

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية  
République Algérienne démocratique et populaire

وزارة التعليم العالي والبحث 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 Master

Mention Électronique

Spécialité microsysteme et microélectronique et conception des circuits

Présenté par

EDDALIA Farid

&

Boubakeur Manel

# Modélisation et optimisation des structures à base de GaAsN et GaAsBi pour le photovoltaïque

Proposé par : Aissat Abdelkader

Année Universitaire 2015-2016

## Remerciements

---

*On remercie ALLAH le Tout-puissant de nous avoir donné le Courage, la volonté et la patience de mener à terme ce présent travail.*

*On tient à exprimer mes vifs remerciements à mon promoteur monsieur A. Aissat Professeur à l'université de Blida, pour son entière disposition, et ses judicieux conseils, sa patience et sa gentillesse, mais surtout pour son esprit paternel.*

*Nos sentiments de profonde gratitude vont à mes professeurs qui tout au long des années d'études nous ont transmis leur savoir sans réserve.*

*On tient à exprimer mes vifs remerciements à monsieur F. Benyettou pour son entière disposition, et ses judicieux conseils, sa patience et sa gentillesse*

*Nos remerciements s'adressent également à tous les membres du jury pour l'honneur qu'ils me font en acceptant de juger mon travail.*

*Nos remerciements vont aussi à tous ceux et celles qui ont participé de près ou de loin à l'élaboration de la présente mémoire.*

*Enfin, on tient à remercier tous mes amis et collègues pour leur soutien moral tout au long de cette préparation.*

*On dédie ce modeste travail à : Mes très chers parents qui n'ont pas cessé de m'encourager et me soutenir dans les moments difficiles et qui ont prié Dieux pour moi, et qui ont su m'entourer de toute leur affection et amour.*

*Tous ceux qui me sont chères*

---

ملخص:

الطاقة الضوئية تحول مباشرة الطاقة الضوئية إلى طاقة كهربائية بواسطة الخلايا الشمسية. هذا العمل هو دراسة ومحاكاة الخلايا الشمسية على أساس المواد GaAsN و GaAsBi. هذه الخلانط الثلاثية التي هي أشباه النواقل III/V لها خصائص مهمة. خصائص الخلايا الشمسية على أساس GaAsN/GaAs وتأثير نقاط الكم على هذا الهيكل بهدف تحسين مردود هذه الأخيرة تمت درستها.

كلمات المفاتيح: الخلايا الشمسية, أرسنيد نيتريد الغاليوم, أرسنيد بزموت الغاليوم, نقاط الكم.

---

#### Résumé :

L'énergie photovoltaïque convertit directement l'énergie lumineuse en énergie électrique par des cellules solaires.

Ce travail consiste à étudier et simuler une cellule solaire à base du matériau GaAsN et GaAsBi. Ces alliages ternaires qui sont des semi-conducteurs III-V présentent des caractéristiques importantes.

Les caractéristiques d'une cellule solaire à base de GaAsN/GaAs et l'influence des boîtes quantiques sur cette structure dans le but d'optimiser le rendement ont été étudiées.

**Mots clés :** cellule solaire, gallium arsénure niture, gallium arsénure bismuth, boîtes quantiques.

---

#### Abstract:

Photovoltaic converts Light energy directly into electrical energy by solar cells.

This work aim to study and simulate solar cell based on GaAsN and GaAsBi material.

These ternary alloys which are semiconductors III-V present important characteristics.

the characteristics of a solar cell based GaAsN / GaAs and influence of quantum dots on this structure in the mean of optimization of its efficiency it was studied.

**Keywords :** Solar cells, Gallium Arsenide Bismide, Gallium Arsenide nitride, quantum dots.

---

## Listes des acronymes et abréviations

**E** : Energie de photon

**h** : Constante de Planck

**C** : Vitesse de la lumière dans le vide

**$\lambda$**  : Longueur d'onde

**AM** : Air mass (masse d'air)

**N**: Azote

**Bi**: bismuth

**As**: Arsenic

**Ga**: Gallium

**BC**: Bande de conduction

**BV**: Bande de valence

**$\alpha$** : Coefficient d'absorption

**$I_{obs}$** : Courant d'obscurité

**q**: Charge élémentaire

**K**: Constante de Boltzmann

**$I_s$** : Courant de saturation

**n**: Coefficient d'idéalité

**$I_{ph}$** : Courant photocourant

**$F(\lambda)$**  : Spectre solaire

**$EQE(\lambda)$** : Efficacité quantique externe

**$I_{cc}$** : Courant de court-circuit

**$V_{oc}$** : Tension à circuit ouvert

**FF**: Facteur de forme

**$P_{max}$** : Puissance maximale

**$\eta(\text{eff})$** : Rendement de conversion

**$P_{inc}$** : Puissance incidente

**$R_s$** : Résistance série

**$R_{sh}$** : Résistance parallèle

**R ( $\lambda$ ):** Réflectivité de la cellule

**w:** Largeur de la couche active

**EQI:** Efficacité quantique interne

**E<sub>g</sub>:** Energie de gap

**$\epsilon$  :** Déformation hydrostatique

**a<sub>s</sub>:** Paramètre de maille du substrat

**a<sub>e</sub>:** Paramètre de maille de la couche active

**$\gamma$ :** Coefficient de poisson

**C<sub>ij</sub> :** Tenseur d'élasticité

**E<sub>v,moy</sub> :** Centre de gravité de la bande de valence

**$\Delta_0$ :** Energie de spin orbite

**a<sub>v</sub>:** Potentiel de déformation dans la bande de valence

**a<sub>c</sub>:** Potentiel de déformation dans la bande de conduction

**$\Delta E^{sh}$ :** Décalage énergétique induit par la contrainte de cisaillement

**b:** Potentiel de déformation tétragonale

**AMN:** Paramètre de couplage de l'azote

**$\Delta E_{lh}$  :** Décalage d'énergie de la bande de trou lourd

**$\Delta E_{hh}$  :** Décalage d'énergie de la bande de trou léger

**E<sub>g</sub><sup>cont</sup> :** Energie de gap contraint

**E<sub>g</sub><sup>ncont</sup> :** Energie de gap non contraint

**n:** Indice de réfraction

**R:** Coefficient de réflexion

**n<sub>1</sub> :** Indice de réfraction de l'air

**n<sub>2</sub> :** Indice de réfraction du matériau

**$\theta_i$  :** Angle de rayon lumineux incident

**$\theta_r$  :** Angle de rayon lumineux réfracté

# Table des matières

Liste des figures .....	
Liste des tableaux.....	
Introduction général .....	1
Chapitre 1	
1.1 Introduction.....	3
1.2 Les semi-conducteurs.....	3
1.2.1 Introduction.....	3
1.2.2 Différents types de semi-conducteurs.....	4
a. Semi-conducteur intrinsèque.....	4
b. Semi-conducteur extrinsèque.....	4
1.2.3 Bande d'énergie .....	4
1.3 Les semi-conducteurs III-V.....	5
1.3.1 Définition des semi-conducteurs III-V.....	5
1.3.2 Les composés binaires, ternaires et quaternaires des semi-conducteurs III/V.....	6
a. Les composés binaires.....	6
b. Les composés ternaires et quaternaires.....	6
1.3.3 Structure cristalline.....	7
1.4 Le choix du matériau .....	8
1.5 propriétés optiques.....	9
1.5.1 indice de réfraction.....	9
1.5.2 coefficient de réflexion.....	10
1.5.3 Absorption.....	10

1.6 propriétés électriques.....	11
1.6.1 le paramétré de maille.....	11
1.6.2 notion de couche contrainte.....	12
1.6.3 Epaisseur critique.....	13
1.6.4 Energie du Gap .....	15
1.7 Généralités sur le photovoltaïques.....	15
1.7.1 Introduction.....	15
1.7.2 Spectre solaire.....	16
1.7.3 Masse d'air.....	18
1.7.4 La bande interdite.....	20
1.7.5 Principe de fonctionnement d'une cellule solaire.....	21
1.7.6 Caractérisation physique des cellules photovoltaïques.....	23
a. Caractéristique courant/tension et schéma équivalent.....	23
1.7.7 Paramètres des cellules photovoltaïques.....	25
a. Courant de court-circuit $I_{cc}$ .....	25
b. Tension de circuit ouvert $V_{co}$ .....	25
c. Facteur de forme FF.....	26
d. Le rendement $\eta$ .....	27
1.8 Conclusion.....	28
Chapitre 2	
2.1 Introduction.....	29
2.2 Paramètres électroniques.....	30
2.2.1 Paramètre de maille.....	30
2.2.2 L'Effet de la contrainte.....	31
2.2.3 L'énergie de bande interdite.....	33
a. Effet de l'azote sur la bande de conduction.....	34
b. L'énergie de bande interdite contrainte.....	35

2.2.4 Epaisseur critique.....	36
2.3 Propriétés optiques.....	38
2.3.1 Le coefficient d'absorption.....	38
2.3.2 Indice de réfraction.....	39
2.3.3 Coefficient de réflexion.....	39
2.4 Différents paramètres de la cellule photovoltaïque pour le GaAsN.....	40
2.4.1 Caractéristiques courant-tension.....	41
a. Caractéristiques I(V) sans boîtes quantiques.....	41
b. Caractéristiques I(V) avec boîtes quantiques.....	42
2.4.2 Puissance et puissance maximal délivrée.....	43
a. Puissance et puissance maximal sans boîtes quantiques.....	43
b. Puissance et puissance maximal avec boîtes quantique.....	44
2.4.3 Efficacité quantique externe.....	45
2.4.4 Résultats final.....	46
2.5 conclusion.....	47
Conclusion Général .....	48
Annexe .....	50
Bibliographie.....	54



## Liste des figures

### Chapitre 1

<b>Figure 1.1</b> : Diagrammes énergétiques pour les trois types de matériaux.....	5
<b>Figure 1.2</b> : mailles cristallographiques des structures Diamant et Zinc Blende.....	7
<b>Figure 1.3</b> : Schéma des chemins optiques au niveau d'un dioptre plan.....	9
<b>Figure 1.4</b> : illustration des deux types de déformation.....	13
<b>Figure 1.5</b> : illustration d'une couche contrainte.....	14
<b>Figure 1.6</b> : Effet photovoltaïque .....	16
<b>Figure 1.7</b> : Spectre électromagnétique .....	17
<b>Figure 1.8</b> : Éclairement solaire.....	18
<b>Figure 1.9</b> : Définition de l'air masse.....	19
<b>Figure 1.10</b> Effet de l'énergie de la lumière sur différentes bandes interdites $E_g$ .....	21
<b>Figure 1.11</b> :structure et diagramme de bande d'une cellule photovoltaïque.....	22
<b>Figure 1.12</b> : Caractéristique courant/tension d'une cellule PV.....	23
<b>Figure 1.13</b> : Schéma équivalent d'une cellule.....	24
<b>Figure 1.14</b> : Différents régimes selon la puissance d'éclairement.....	26
<b>Figure 1.15</b> : Le facteur de forme dans la courbe I-V.....	27

### Chapitre 2

<b>Figure 2.1</b> Variation du paramètre de maille du $\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x$ en fonction de la concentration du bismuth.....	30
<b>Figure 2.2</b> Variation du paramètre de maille du $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ en fonction de la concentration de l'azote.....	31
<b>Figure 2.3</b> Variation du désaccord de maille en fonction de la concentration du bismuth.....	32
<b>Figure 2.4</b> Variation du désaccord de maille en fonction de la concentration de l'azote.....	32

<b>Figure 2.5</b> Variation d'énergie de gap du $\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x$ en fonction de la concentration Du bismuth.....	33
<b>Figure 2.6</b> Variation d'énergie de gap du $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ en fonction de la concentration du l'azote.....	34
<b>Figure 2.7</b> : variation de l'énergie de la bande interdite en fonction du pourcentage d'azote.....	35
<b>Figure 2.8</b> : variation de l'énergie de gap contraint avec éclatement ( $E_{ghh}, E_{glh}$ ) de la structure GaAsN en fonction des fractions d'azote.....	36
<b>Figure 2.9</b> Variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration du bismuth.....	37
<b>Figure 2.10</b> Variation de l'épaisseur critique en fonction de concentration d'azote.....	37
<b>Figure 2.11</b> Variation du coefficient d'absorption $\alpha$ en fonction de l'énergie de photon incident E.....	38
<b>Figure 2.12</b> Variation de l'indice de réfraction en fonction de la longueur d'onde.....	39
<b>Figure 2.13</b> Variation de Coefficient de réflexion en fonction de la longueur d'onde.....	40
<b>Figure 2.14</b> : structure $\text{GaAs}_{0.95}\text{N}_{0.05}/\text{GaAs}$ à 10 couches QDs.....	41
<b>Figure 2.15</b> Caractéristiques courant-tension de la structure $\text{GaAs}_{0.95}\text{N}_{0.05}$ .....	42
<b>Figure 2.16</b> Caractéristiques courant-tension de la structure $\text{GaAs}_{0.95}\text{N}_{0.05}$ pour différentes couches QDs.....	43

<b>Figure 2.17</b> Puissance délivrée par la cellule solaire en fonction de la tension.....	44
<b>Figure 2.18</b> Puissance délivrée par la cellule solaire en fonction de la tension pour différentes couches QDs.....	45
<b>Figure 2.19</b> : variation de l'efficacité quantique externe en fonction de fractions d'azote sans et avec boites quantiques.....	46
<b>Annexe A</b>	
Figure A.1 diagramme de bande.....	51
Figure A.2 diagramme de bande avec des niveaux intermédiaire.....	51
<b>Annexe B</b>	
<b>Figure B.1</b> : tableau de Mendeleïev.....	52

## Liste des tableaux

### Chapitre 1

**Tableau 1.1** : Extrait de la classification périodique des éléments.....5

**Tableau 1.2** : Longueurs d'ondes approximatives des différentes couleurs

dans le vide.....18

**Tableau 1.3**: Résumé des différentes distributions spectrales.....20

**Tableau 1.4** Bandes interdites de quelques semi-conducteurs.....20

### Chapitre 2

**Tableau 2.1** différents paramètres de la cellule solaire sans QDs.....42

**Tableau 2.2** : résultats finals de l'effet du nombre de QDs sur la structure

GaAs<sub>0.95</sub>N<sub>0.05</sub>.....46

### Annexe

**Tableau B.1** Paramètres physiques fondamentaux des principaux

binaires III-V.....52

**Tableau B.2** Coefficients de Sellmeier pour les principaux

binaires III-V.....53

**Tableau B.3** Coefficients d'absorption pour les principaux binaires III-V.....53

# Introduction générale

---

La crise actuelle du pétrole a frappé de plein fouet le monde industrialisé dont l'activité économique est irrémédiablement rattachée aux aléas de la disponibilité de l'or noir [1]. Devant cette conjoncture, les pays industrialisés se doivent d'analyser froidement tant les avantages que les inconvénients, tant les possibilités que les limitations des potentiels énergétiques autres qui pourraient être exploités avant de s'engager de façon irréversible dans une direction donnée [1].

Parmi les "énergies nouvelles", ou pour être plus exact, les "énergies retrouvées", nous convenons de mentionner l'énergie éolienne, l'énergie de la biomasse et l'énergie solaire [1].

Nous nous intéressons à "l'énergie solaire", qui se caractérise par une absence de pollution, par sa disponibilité fait l'objet d'un grand intérêt ces dernières années. En effet, les systèmes d'exploitation qui utilisent cette forme d'énergie demandent une légère maintenance et présentent une bonne fiabilité de fonctionnement, une autonomie de plus en plus accrue, une résistance extrême aux conditions naturelles (température, humidité, vent, corrosion, etc.), et donc une grande longévité [1].

Il apparaît dès lors que l'énergie solaire peut apporter de réelles solutions aux divers problèmes qui se posent actuellement concernant les changements climatiques, les crises énergétiques [1].

L'exploitation directe de l'énergie solaire au moyen de capteurs relève de deux technologies bien distinctes : l'une produit des calories, c'est l'énergie solaire thermique, et l'autre produit de l'électricité, c'est l'énergie solaire photovoltaïque [2].

L'énergie solaire photovoltaïque nous permet de convertir directement le rayonnement solaire en électricité à l'aide des composants optoélectroniques appelés

cellules photovoltaïques. Ces composants sont généralement à base des semi-conducteurs et leurs alliages correspondant, comme le matériau ternaire III-V  $\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x$  /  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$  et nous avons étudié l'optimisation et modélisation des structures à base des matériaux précédents, qui fait l'objet de ce mémoire [2].

L'étude présentée dans ce mémoire est organisée en deux chapitres d'une manière assez fusionnée, les différents paramètres électroniques et optiques des cellules photovoltaïques à base de  $\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x$  /  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ , ainsi que les équations mathématiques permettant de faire des analyses numériques.

- Le premier chapitre est consacré aux notions fondamentales des matériaux Semi-conducteurs III-V, l'étude des matériaux  $\text{GaAsN}$ ,  $\text{GaAsBi}$  et ses caractéristiques structurales, électriques et optiques ainsi que des généralités sur le photovoltaïque et la description du principe de fonctionnement des cellules solaires.
- Le deuxième chapitre présente les résultats de simulation d'une structure à base des matériaux  $\text{GaAsN}$  et  $\text{GaAsBi}$  par silvaco.

Le but de ce travail est d'améliorer les performances des cellules solaires on améliore le rendement avec l'utilisation des nouveaux matériaux.

## 1.1 Introduction

Dans ce premier chapitre nous allons aborder les principales caractéristiques des semi-conducteurs et plus particulièrement les semi-conducteurs III-V qui ont connus une grande révolution en électronique et en optoélectronique, ce qui a abouti à l'apparition des structures à couches semi-conductrices très fines et de très bonne qualité, d'où l'avènement des nouveaux produits (diodes, transistors, diodes laser à semi-conducteur) ainsi que les nanostructures (puits quantiques, boîtes quantiques, ...).

Par la suite nous nous pencherons sur le photovoltaïque qui représente un enjeu important dans les énergies renouvelables et plus généralement dans les énergies en général.

Nous aborderons brièvement l'histoire du photovoltaïque : nous présenterons le principe de fonctionnement d'une cellule solaire ainsi que les paramètres photovoltaïques afin d'améliorer les performances des cellules solaires.

## 1.2 Les semi-conducteurs

### 1.2.1 Introduction

On différencie trois types des matériaux : les isolants, les conducteurs et les Semi-conducteurs. Ceux-ci sont intermédiaires entre les métaux et les isolants :

à  $T = 0 \text{ K}$  un semi-conducteur se comporte comme un isolant. Néanmoins, il conduit l'électricité dès que la température augmente. La résistivité des semi-conducteurs 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  $10^{22} \Omega\text{cm}$ .

Dans un semi-conducteur il existe deux types de conduction : la conduction par électrons et la conduction par trou. Lorsque dans un cristal certaines liaisons entre atomes se cassent, les électrons sont libres de se déplacer. L'emplacement de la liaison cassée est appelé trou. Sous l'effet du champ électrique les électrons se déplacent dans le sens inverse du champ et les trous se déplacent dans le sens de champ [3].

### **1.2.2 Différents types de semi-conducteurs**

#### **a. Semi-conducteur intrinsèque**

Un semi-conducteur est dit intrinsèque si le nombre d'électrons est égal au nombre de trous. Le taux d'impuretés y est très faible (moins d'un atome pour  $10^{13}$  atomes de l'élément semi-conducteur).

#### **b. Semi-conducteur extrinsèque**

Un semi-conducteur est dit extrinsèque s'il comporte un taux d'impuretés très grand par rapport à celui du semi-conducteur intrinsèque (un atome pour  $10^5$  atomes de l'élément semi-conducteur). Selon la nature des impuretés il existe deux types des semi-conducteurs : type n et type p.

### **1.2.3 Bande d'énergie**

En termes d'énergie, la différence entre la bande de valence et la bande de conduction est appelée un écart énergétique. Il s'agit en fait de la quantité d'énergie que doit avoir un électron pour sauter de la bande de valence vers la bande de conduction. Une fois dans la bande de conduction, l'électron est libre de se déplacer à travers le matériau et n'est plus lié à aucun atome particulier.

La Figure 1.1 montre les diagrammes d'énergie pour un isolant, un semi-conducteur et un conducteur.



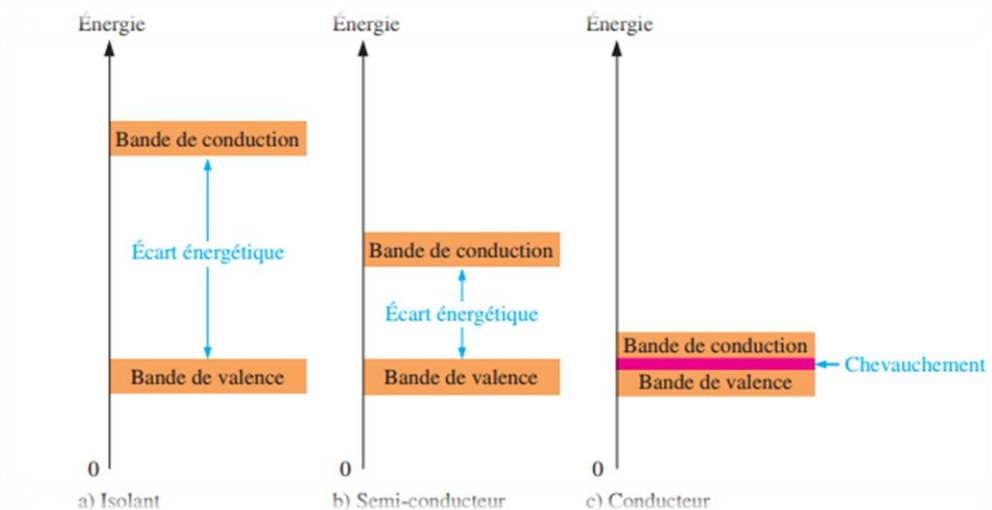


Figure 1.1 : Diagrammes énergétiques pour les trois types de matériaux [3].

### 1.3 Les semi-conducteurs III-V

#### 1.3.1 Définition des semi-conducteurs III-V

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la III colonne et d'un élément de la V colonne de la classification périodique de Mendeleïev. [4]

Le Tableau 1.1 représente une partie de la table de Mendeleïev, dite tableau périodique des éléments, contenant des matériaux semi-conducteurs.

III		V	
B (5) 0.85 2.0	C (6) 0.7 2.5	N (7) 0.65 3.0	O (8) 0.6 3.5
Al (13) 1.25 1.5	Si (14) 1.1 1.8	P (15) 1 2.1	S (16) 1 2.5
Ga (31) 1.3 1.6	Ge (32) 1.25 1.8	As (33) 1.15 2.0	Se (34) 1.15 2.4
In 1.55 1.7	Sn 1.45 1.8	Sb 1.45 1.9	Te 1.4 2.1
Tl 1.9 1.8	Pb 1.8 1.9	Bi 1.6 1.9	Po 1.9 2.0

Tableau 1.1 : Extrait de la classification périodique des éléments [4].

### 1.3.2 Les composés binaires, ternaires et quaternaires des semi-conducteurs III/V

#### a. Les composés binaires

L'étude de propriétés des composés binaires, et en particulier de la structure de bandes montre que les éléments les plus légers donnent des composés dont laquelle la bande interdite est large et indirecte, et dans laquelle la masse effective des électrons est élevée. Les composés contenant du bore, de l'aluminium ou de l'azote entrent dans cette catégorie ; ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide [5].

A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le thallium ou le bismuth donnent des composés à base de Gallium (GaAs, GaSb) ou d'indium (InP, InAs, InSb) dont les propriétés sont les plus intéressantes [6].

#### b. Les composés ternaires et quaternaires

L'intérêt pratique des semi-conducteurs III-V est encore considérablement renforcé par la possibilité de réaliser des alliages par substitution partielle de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne. On sait par exemple obtenir des alliages ternaires, ou quaternaires qui sont identifiés de la façon suivante :

**Ternaires** : S'il y a substitution de 2 atomes sur l'un des sous réseaux, soit :  $A_x A'_{(1-x)} B$ .

Exemple :  $Ga_x In_{(1-x)} P$ , lorsque la composition exacte compte peu, on écrit tout court **GaInP**.

**Quaternaires 1+3** : S'il y a substitution de 3 atomes sur des sous réseaux soit :

$A_x A'_y A''_{(1-x-y)} B$ .

Exemple :  $Ga_x In_y Al_{(1-x-y)} As$ .

**Quaternaires 2+2** : S'il y a substitution de 2 atomes sur chacun des deux sous réseaux,

soit :  $A_x A'_{(1-x)} B_y B'_{(1-y)}$ .

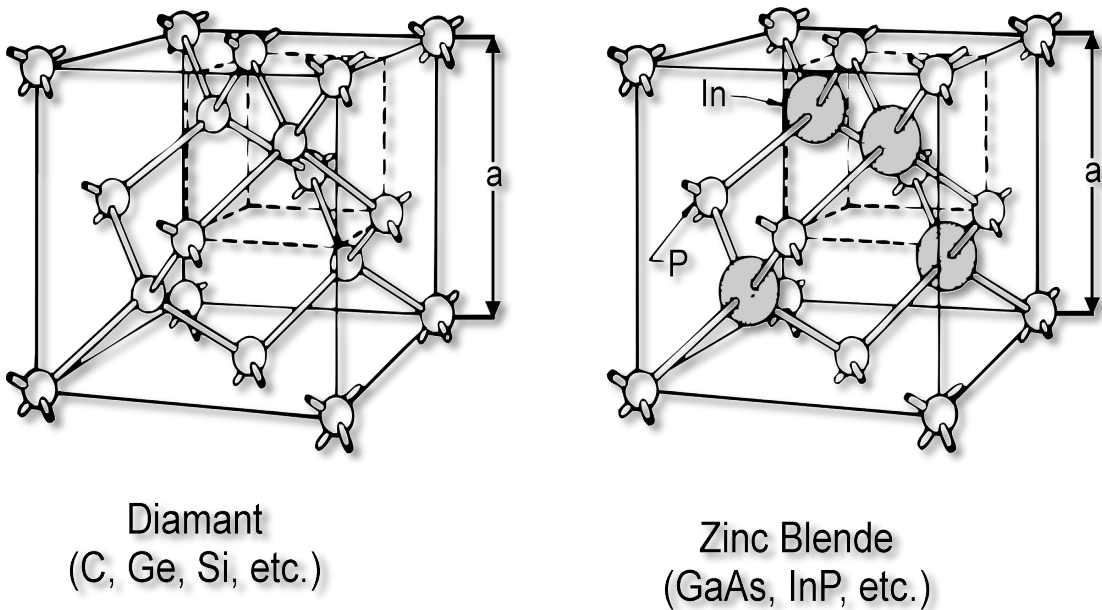
Exemple  $Ga_x In_{(1-x)} P_y As_{(1-y)}$ .

La plupart des solutions solides ainsi réalisées sont complètes, la loi de Vegard (relation linéaire entre le paramètre de réseau et la composition) est

approximativement suivie, et on observe une évolution progressive et régulière des propriétés (dont la bande interdite et les paramètres cristallins) en fonction du taux de substitution.

### 1.3.3 Structure cristalline

La plupart des matériaux III-V se cristallisent dans la structure sphalérite dite « Zinc Blende » présentée sur la Figure 1.2. Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant, est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées, l'un étant constitué des atomes de l'élément III, l'autre des atomes de l'élément V. Ces deux sous-réseaux sont décalés l'un par rapport à l'autre le long de la diagonale du cube, d'une quantité  $(a_0/4, a_0/4, a_0/4)$ ,  $a_0$  étant le paramètre cristallin, c'est-à-dire la longueur de l'arête du cube élémentaire [7].



**Figure 1.2:** mailles cristallographiques des structures Diamant et Zinc Blende [7].

De ce fait dans les matériaux III-V, les liaisons ne sont pas simplement covalentes comme dans le Silicium. Elles reposent sur le transfert d'électrons des atomes du groupe V sur ceux du groupe III. Dans le cas du phosphore d'indium, le phosphore possède cinq électrons périphériques et l'indium trois. Dans le cristal, chaque atome de phosphore est entouré de quatre atomes d'indium, et chaque atome d'indium est entouré de quatre atomes de phosphore.

Il se produit alors un échange d'électrons, et le cristal se construit avec les ions  $P^+$  et  $In^-$ , qui ont tous quatre électrons périphériques. Cette répartition est à l'origine du caractère partiellement ionique et partiellement covalent des liaisons (semi-conducteurs polaires), qui sont orientées dans l'espace suivant les axes de symétrie d'un tétraèdre régulier [8].

#### **1.4 Le choix du matériau**

Les composés III-V permettent de balayer une large plage de valeurs du gap, ce qui offre la possibilité de couvrir un large spectre de longueurs d'ondes, constituant ainsi, une propriété très importante du point de vue de l'optique.

L'intérêt pratique des matériaux III-V est renforcé par la possibilité de fabriquer des alliages ternaires et quaternaires par substitution partielle de l'un des éléments par un élément de la même colonne.

Le ternaire  $GaAs_{1-x}N_x$  a été étudié pendant plus d'une décennie en raison de ses applications potentielles pour l'optoélectronique dans les domaines spectrales bleu et ultraviolet. Pour son grand coefficient de Boeing, l'alliage  $GaAs_{1-x}N_x$  baisse simultanément à la fois le paramètre de maille et la largeur de la bande interdite. Cependant, en raison de la grande différence de taille entre l'azote et l'arsenic, la croissance de haute qualité  $GaAs_{1-x}N_x$  sur substrat GaAs est difficile.

Les alliages  $GaAs_{1-x}Bi_x$  peuvent offrir des propriétés complémentaires à celles des nitrures dilués. Il a été montré que l'ajout du Bi dans le GaAs modifie sa bande de valence. L'énergie de bande interdite  $E_g$  est abaissée, ce qui conduit à décaler efficacement les émissions de la matrice GaAs dans la gamme spectrale infrarouge. [9]

L'incorporation du Bismuth et d'azote dans GaAs peut réduire considérablement la concentration d'azote nécessaire pour diminuer la largeur de la bande interdite. La compensation de la contrainte entre l'azote de petite taille et le Bismuth de grande taille réduit également les énergies de formation de l'alliage.

## 1.5 Propriétés optiques

Les propriétés optiques d'un matériau recouvrent principalement son indice de réfraction et son coefficient d'absorption. Ces propriétés sont primordiales pour les composants optoélectroniques puisqu'elles régissent le déplacement de la lumière dans le composant. Par exemple, dans un composant composé de différents matériaux, la lumière a tendance à se propager dans les matériaux ayant le plus fort indice de réfraction. On peut alors confiner la lumière dans une couche particulière, comme dans les lasers. Cette propriété est aussi très intéressante pour les applications de cellules solaires afin d'augmenter les efficacités d'absorption de la lumière.

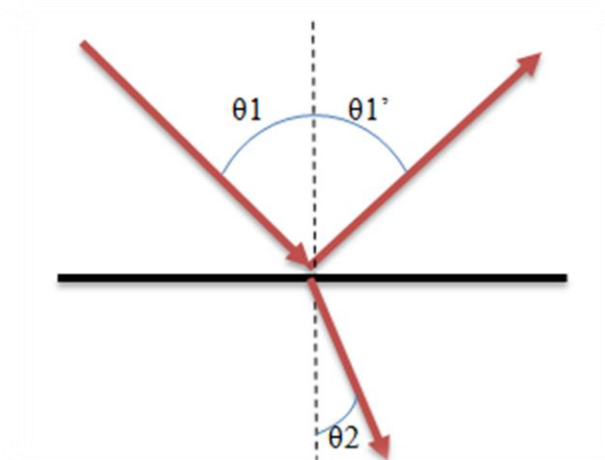
### 1.5.1 Indice de réfraction

L'indice de réfraction provient du phénomène de réfraction qui désigne le changement de direction de la lumière au passage d'un milieu à un autre. La notion d'indice de réfraction a d'abord été introduite empiriquement comme coefficient dans les lois de Snell-Descartes [10].

$$n_1 \sin\theta_i = n_2 \sin\theta_r \quad 1.1$$

avec :

- $n_1$  et  $n_2$  : les indices de réfractifs de deux milieux.
- $\theta_i$  et  $\theta_r$  : les angles des rayons lumineux par rapport à la normale.



**Figure 1.3:** Schéma des chemins optiques au niveau d'un dioptre plan [10].

L'une des raisons pour laquelle nous étudions l'indice de réfraction est de réduire la réflectivité des matériaux et par conséquent, augmenter l'intensité du faisceau incident, et ce par l'introduction de couches additionnelles. Ces films doivent avoir une épaisseur bien spécifique et un indice de réfraction approprié pour pouvoir jouer le rôle de couches antireflet [10].

La variation de l'indice de réfraction  $n$  en fonction de la longueur d'onde a été évaluée selon la formule de Sellmeier [11] :

$$n^2(\lambda) = A + \frac{B}{1-C/\lambda^2} + \frac{D}{1-E/\lambda^2} \quad 1.2$$

Avec A, B, C, D, E sont les coefficients de Sellmeier.

Les valeurs du coefficient de Sellmeier pour différents semi-conducteurs sont données dans l'annexe B.

### 1.5.2 Coefficient de réflexion

La réduction de la réflexion de la lumière se fait en jouant sur les indices de réfraction des matériaux traversés. Plus la différence des indices de réfraction est élevée de part et d'autre d'une surface, plus elle est réfléchissante [10].

La réflexion s'exprime par l'équation suivante :

$$R = \left( \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \right)^2 \quad 1.3$$

### 1.5.3 Absorption

Seule la lumière absorbée est restituée sous forme d'énergie électrique. Le matériau photovoltaïque utilise différemment toutes les longueurs d'ondes du spectre solaire : il se caractérise par sa réponse spectrale, c'est-à-dire l'efficacité avec laquelle il transforme l'énergie d'un rayonnement d'une longueur d'onde en énergie électrique. Cette efficacité dépend essentiellement des caractéristiques du matériau [10].

Le coefficient d'absorption ( $\alpha$ ), est une propriété qui définit la quantité de lumière absorbée par un matériau. Les électrons dans la bande de valence d'un semi-

conducteur peuvent absorber des photons dont l'énergie est plus grande que l'énergie de bande interdite ( $E$ ), puis passer à la bande de conduction. Le coefficient d'absorption  $\alpha(E)$ , pour une énergie  $E$  supérieure à l'énergie de la bande interdite est donnée par :

$$\alpha(E) = \alpha_0 \frac{\sqrt{E-E_g}}{E} \quad 1.4$$

où

$\alpha(E)$  : coefficient d'absorption en fonction de l'énergie du photon  $E$ .

$\alpha_0$  : constante.

$E_g$  : énergie de Gap du matériau semi-conducteur

Les valeurs du coefficient d'absorption ( $\alpha_0$ ) pour différents semi-conducteurs sont données dans l'annexe B.

## 1.6 Propriétés électriques

### 1.6.1 Le paramétré de maille :

Le paramètre de maille se définit comme étant la distance entre deux atomes dans un cristal. Lorsqu'un atome étranger est introduit dans le réseau cristallin, il provoque en général une variation du paramètre cristallin qui se traduit par une expansion ou une contraction du réseau, en fonction de la taille des atomes. On dit que la variation de «  $a$  » obéit à la loi de Végard si elle est linéaire avec le taux de substitution  $x$  [12].

Nous avons utilisé la loi de Végard donnée par l'équation 1.5 pour le calcul du paramètre de maille :

$$a(\text{GaAs}(z)) = (1 - x) * a(\text{GaAs}) + x * a(\text{Ga}(z)) \quad 1.5$$

Avec  $z$  est le Bismuth (Bi) ou l'Azote (N).

Les valeurs de paramètre de maille pour différents semi-conducteurs sont données dans l'annexe B.

## 1.6.2 Notion de couche contrainte

L'épitaxie de matériaux désaccordés est devenue bien maîtrisée, grâce notamment aux progrès accomplis au niveau des techniques de croissance. Ainsi, l'accord de maille n'est plus un impératif, mieux encore les effets des contraintes sont exploités dans plusieurs composants électroniques et optoélectroniques performants. En effet, l'utilisation d'hétérostructures à contrainte permet d'ajuster la longueur d'onde d'émission, en modifiant les positions en énergie des bandes de valence et de conduction.

L'épitaxie des matériaux GaAsN et GaAsBi sur GaAs ont des paramètres de maille initialement différent provoque une contrainte. Le substrat de paramètre de maille  $a_s$  différent de celui de la couche épitaxie  $a_e$ , impose sa maille à cette dernière, cette différence de maille provoque une déformation de la couche épitaxie, soit en tension ou en compression par des déformations biaxiales ( $\epsilon_{yy}$  et  $\epsilon_{zz}$ ) et uniaxiale ( $\epsilon_{xx}$ ) [13]. Prenons le cas des deux cristaux comme le montre la Figure 1.4.

Les déformations sont données par [13] :

- Biaxiale dans le plan de croissance :

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \frac{a_s - a_e}{a_e} = \epsilon_{//} \quad 1.6$$

- uniaxiale dans la direction de croissance :

$$\epsilon_{zz} = -2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \epsilon_{xx} = \epsilon_{\perp} \quad 1.7$$

où :

- $\epsilon$  : La déformation ou le désaccord de maille.
- $a_s$  : Le paramètre de maille du substrat (GaAs).
- $a_e$  : Le paramètre de maille de la couche épitaxie.
- $C_{ij}$  : Les coefficients d'élasticité.



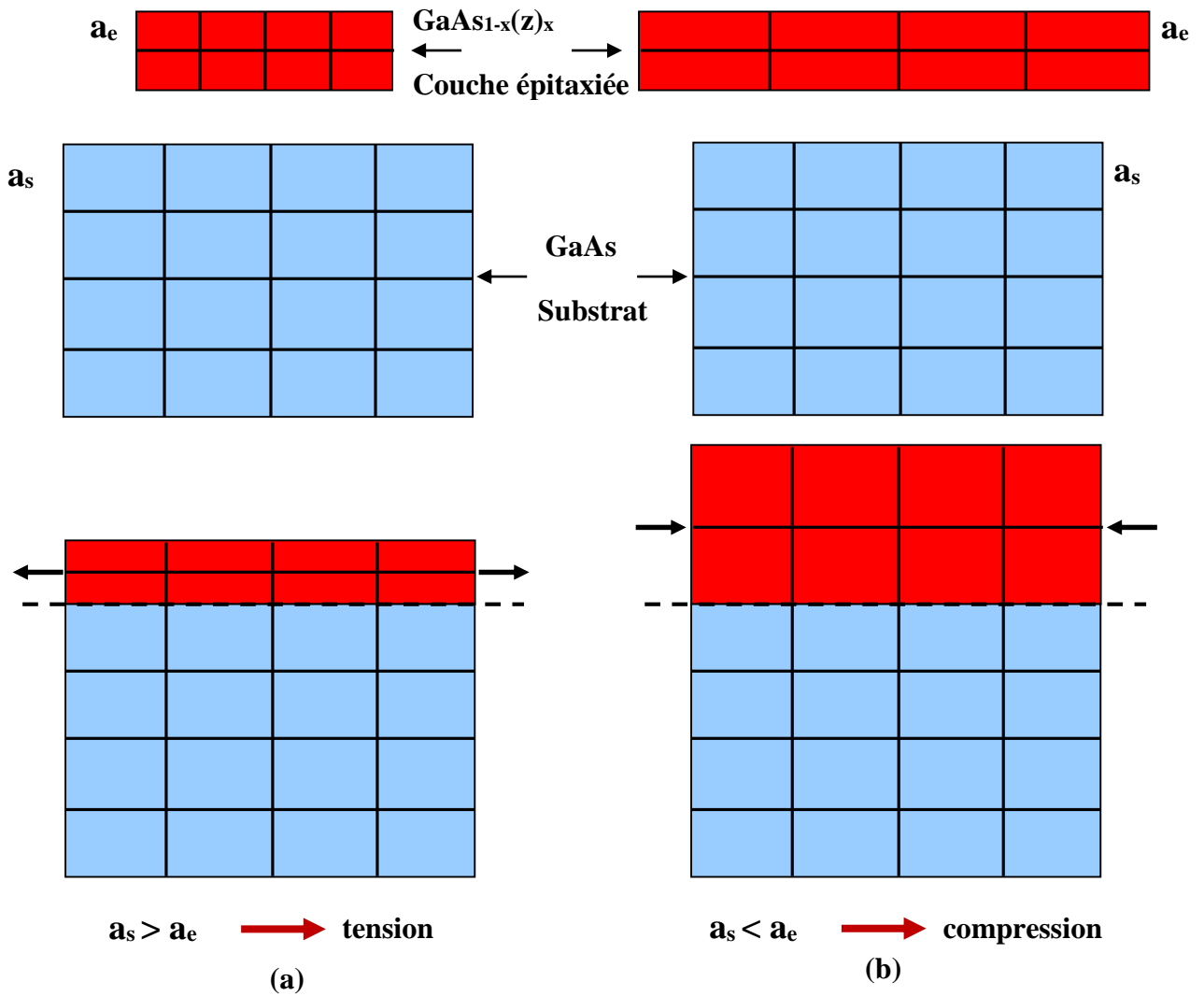


Figure 1.4: illustration des deux types de déformation [13].

a) Couche en tension      b) couche en compression

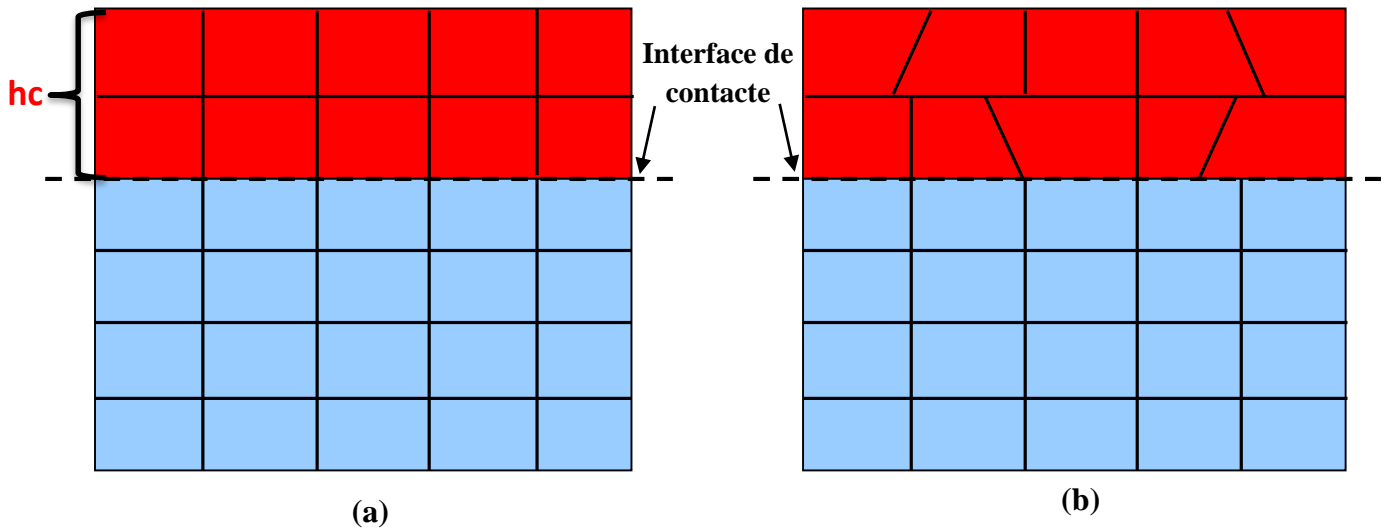
### 1.6.3 Epaisseur critique

Lors de l'épitaxie d'un matériau sur un substrat de paramètre de maille différent, les couches contraintes commencent à relaxer, et génèrent des dislocations qui se propagent de l'interface de contact vers le ternaire, qui s'accompagne d'une accumulation d'énergie élastique. Cette épaisseur limite est appelée épaisseur critique.

Au-delà de cette épaisseur critique, l'énergie élastique emmagasinée devient suffisante pour générer des défauts structuraux qui relaxent partiellement les contraintes dans le cristal.

Le matériau tend alors à reprendre son paramètre de maille, et des dislocations apparaissent à l'interface (relaxation plastique).

L'épaisseur critique dépend directement de la différence du paramètre de maille entre le substrat et la couche sur la Figure 1.5.



**Figure 1.5** : illustration d'une couche contrainte [14].

a) Compression      b) relaxée

L'épaisseur critique de la couche contrainte  $h_c$  est l'un des paramètres les plus importants que nous devons prendre en compte.

La valeur de l'épaisseur critique  $h_c$  qui en résulte dans le cas d'un matériau de structure sphalérite (zinc blende) épitaxie sur la surface (001) est donnée par l'équation suivante [14] :

$$h_c = \frac{a_e}{\beta \cdot \sqrt{2} \cdot \pi \cdot \Delta} * \frac{1 - 0.25 \cdot \gamma}{1 + \gamma} * \ln \left( \frac{h_c \cdot \sqrt{2}}{a_e} + 1 \right) \quad 1.8$$

avec

- $\Delta$  : le désaccord paramétrique qui est donné par  $\Delta = \left| \frac{a_s - a_e}{a_s} \right|$
- $\gamma$  : le coefficient de poisson qui est donné par  $\gamma = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}}$

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

- $a_e$  : Paramètre de maille de la couche relaxée.
- $\beta$  : est un coefficient qui prend les valeurs suivantes selon le type de la structure.

Structure	Couche unique	Puits quantique	Super réseau
Valeur de $\beta$	4	2	1

### 1.6.4 Energie du Gap

L'énergie du Gap  $E_g$  est la mesure de la quantité d'énergie nécessaire à un électron pour passer de la bande de valence à la bande de conduction lorsque celui-ci est soumis à une excitation.

Le gap énergétique pour la plupart des alliages ternaires est approximativement donné sous la forme d'une fonction quadratique :

$$E_g(\text{GaAs}(z)) = (1 - x) * E_g(\text{GaAs}) + x * E_g(\text{Ga}(z)) - b * x * (1 - x) \quad 1.9$$

Avec

- $z$  : le Bismuth (Bi) ou l'Azote (N).
- $b$  : le paramètre de courbure (bowing paramètre).
- $x$  : la concentration de Bi ou N.

## 1.7 Généralités sur le photovoltaïques

### 1.7.1 Introduction

L'effet photovoltaïque a été découvert par Alexandre Edmond Becquerel en 1839. L'effet photovoltaïque est obtenu par absorption des photons dans un matériau semi-conducteur qui génère alors une tension électrique.

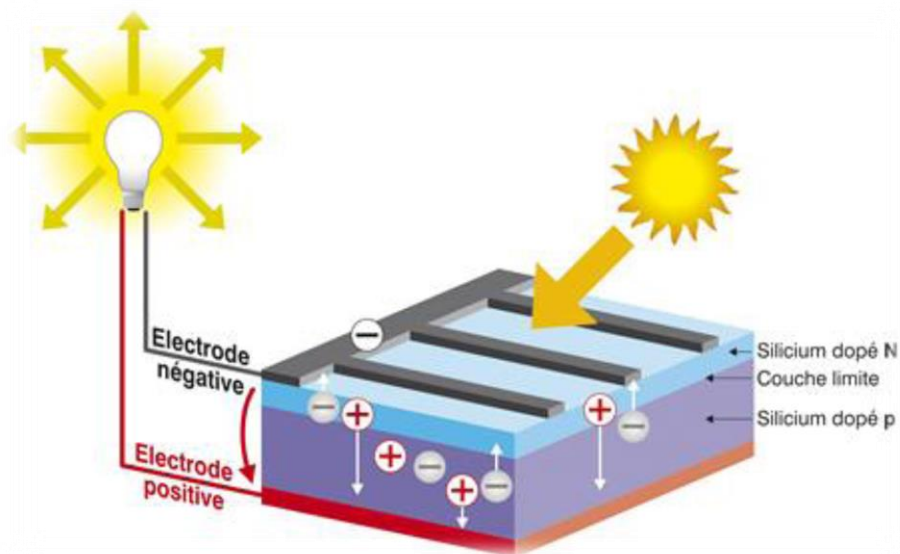
L'énergie solaire photovoltaïque provient de la conversion directe du rayonnement solaire en électricité. Elle utilise pour ce faire des modules photovoltaïques composés

de cellules solaires qui réalisent cette transformation d'énergie en produisant du courant continu, qui peut être utilisé pour alimenter un appareil ou recharger une batterie. La conversion photovoltaïque a été réalisée pour la première fois dans le laboratoire Bell en 1954 sur une simple jonction **PN** au Silicium. Par suite, plusieurs semi-conducteurs ont été utilisés pour cet objectif.

Trois processus élémentaires interviennent dans l'effet photovoltaïque (Figure 1.6) :

- L'absorption de la lumière dans le matériau.
- Le transfert d'énergie des photons aux charges électriques.
- La collecte des charges.

Il est donc clair qu'un matériau doit avoir des propriétés optiques et électriques spécifiques pour permettre la conversion photovoltaïque.



**Figure 1.6** : Effet photovoltaïque [15].

### 1.7.2 Spectre solaire

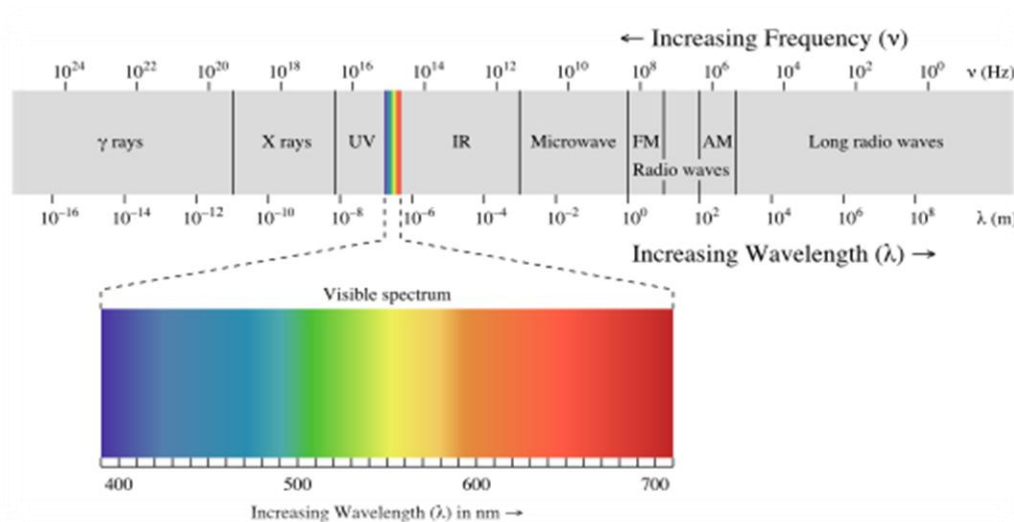
Le soleil émet un rayonnement électromagnétique, sa décomposition en longueurs d'ondes est appelée spectre électromagnétique. Elle est en effet composée de toutes sortes de rayonnement de couleurs différentes, caractérisées par leur gamme de longueur d'onde.

La fréquence de la lumière détermine sa couleur. Les photons, grains de lumière qui composent ce rayonnement, sont porteurs d'une énergie qui est reliée à leur fréquence (longueur d'onde) par la relation :

$$E = h \nu = \frac{h}{c \lambda} \quad 1.10$$

Où  $h$  est la constante de Planck,  $\nu$  la fréquence,  $c$  la vitesse de la lumière et  $\lambda$  la longueur d'onde. C'est cette relation mise à jour par Louis de Broglie en 1924 qui a confirmé la nature à la fois corpusculaire et ondulatoire de la lumière : présence de corpuscules « les photons » et propagation d'ondes avec une fréquence de vibration et une longueur d'onde.

La Figure 1.7 montre la partie visible du spectre électromagnétique. La gamme des longueurs d'onde visibles est comprise entre **390 nm** (violet) à **780 nm** (rouge).



**Figure 1.7** : Spectre électromagnétique [16].

Le Tableau 1.2 montre la gamme de longueur d'onde approximative des couleurs visibles.

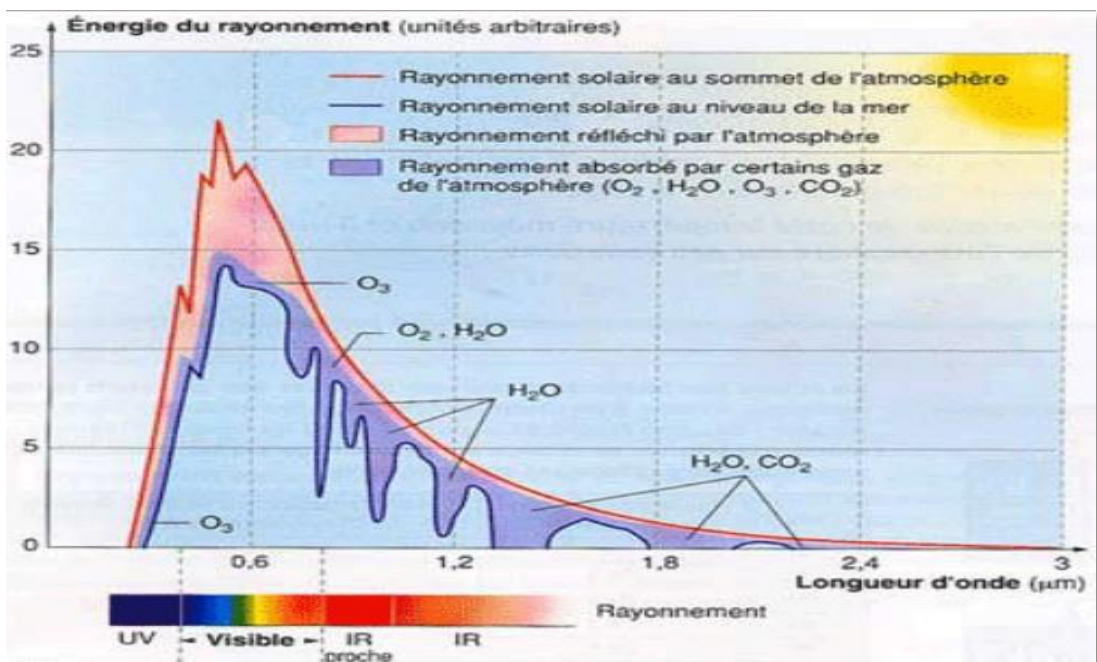
<b>Le spectre de lumière visible</b>	
<b>Couleur</b>	<b>Longueur d'ondes (nm)</b>
Rouge	622-780
Orange	597-622
Jaune	577-597
Vert	492-577
Bleu	455-492
Violet	390-455

**Tableau 1.2 :** Longueurs d'ondes approximatives des différentes couleurs dans le vide [17].

Le soleil émet de la lumière de l'ultraviolet aux infrarouges en passant par le visible du spectre électromagnétique. L'irradiance solaire a la plus grande ampleur aux longueurs d'onde visibles et un pic dans le bleu-vert.

### 1.7.3 Masse d'air

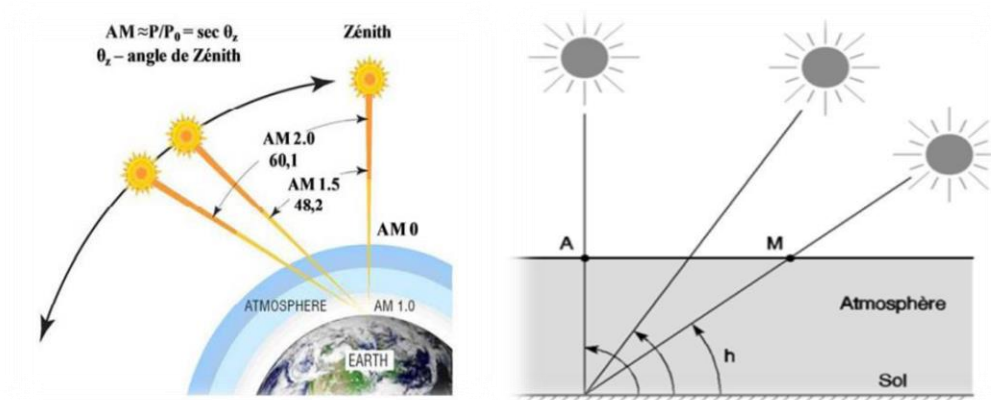
Le spectre du rayonnement électromagnétique solaire comporte une très grande étendue, depuis les rayonnements radio jusqu'aux rayons X. on distingue en générale le spectre continu, qui est sensiblement celui d'un corps noir à environ 6000 KO et le spectre réel d'émission du soleil [18] représenté sur la Figure 1.8.



**Figure 1.8:** Éclairement solaire [18].

L'intensité lumineuse issue du soleil normalement incidente sur la surface de la terre est appelée la constante solaire. Cette constante est approximativement d'une valeur de 1,4 KW/m<sup>2</sup> au-dessus de la couche atmosphérique et est réduite sur la terre à 1 KW/m<sup>2</sup> par la réflexion et l'absorption des particules présentes dans la couche atmosphérique. Cette perte est appelée la masse d'air AMx [19].

Plus le soleil est bas sur l'horizon, plus il va traverser une épaisseur importante d'atmosphère et plus il va subir des transformations. Donc masse d'air ou Air Mass (AM) en anglais, le rapport entre l'épaisseur d'atmosphère traversée par le rayonnement direct pour atteindre le sol et l'épaisseur traversée au vertical du lieu [20].



**Figure 1.9 :** Définition de l'air masse [20].

La longueur du trajet d'un rayon solaire incliné par rapport à l'horizontale d'un angle h est donnée par la formule :

$$OM = \frac{OA}{\sin h} \quad 1.11$$

Donc l'Air Mass

$$\frac{OM}{OA} = \frac{1}{\sin h} \quad 1.12$$

Dans l'expression, AMx, x désigne ce rapport  $\frac{OM}{OA}$

AM1 : Soleil au zénith (au niveau de la mer).

AM2 : Soleil à 30°

AM1.5 : Soleil à 45°

AM0 : Rayonnement solaire hors atmosphère.

Le Tableau 1.3 montre un résumé sur les différentes distributions spectrales.

Hauteur	Position de Soleil	Irradiance (intensité, puissance) (W /m <sup>2</sup> )	Distribution Spectrale
En dehors de L'atmosphère	-	1367	AM0
Surface	a =90°	925	AM1
Surface	a =48°	693	AM1.5
Surface	a =60°	691	AM2

**Tableau 1.3:** Résumé des différentes distributions spectrales [20].

#### 1.7.4 La bande interdite

La bande interdite (l'énergie de gap)  $E_g$  d'un semi-conducteur détermine comment réagit une cellule solaire à la lumière. Le Tableau 1.4 montre les valeurs de la bande interdite de quelques semi-conducteurs.

Matériel	Bande interdite (eV) à 300 K
Si	1.12
Ge	0.66
GaAs	1.42
InP	1.34

**Tableau 1.4** Bandes interdites de quelques semi-conducteurs [21].

La bande interdite du matériau semi-conducteur détermine la longueur d'onde de la lumière nécessaire pour générer de l'énergie électrique. La relation reliant la bande interdite et la longueur d'onde est :



$$\lambda (\mu\text{m}) = \frac{h c}{E_g(\text{eV})} = \frac{1.24}{E_g(\text{eV})} \quad 1.13$$

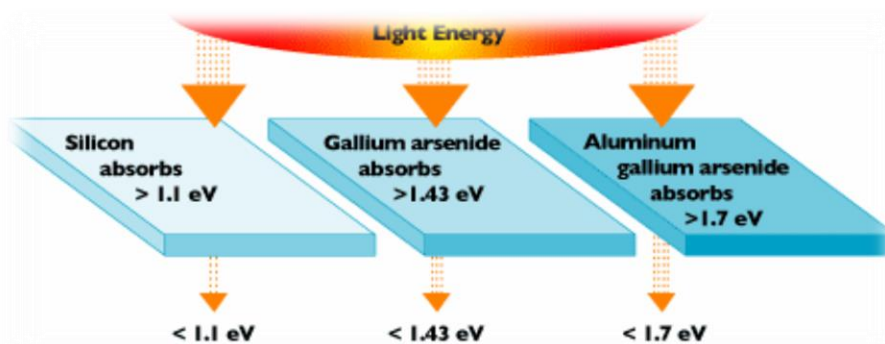
où

- $\lambda$  est la longueur d'onde en  $\mu\text{m}$ .
- $h$  est la constante de Planck en J.S ( $6,626 \times 10^{-34}$ ).
- $c$  est la vitesse de la lumière dans le vide en cm/s ( $3 \times 10^{10}$ ).
- $E_g$  est l'énergie de gap en  $\text{eV}$  ( $1\text{eV} = 1.6 \times 10^{-19}\text{J}$ ).

Dans le cas d'arséniure de gallium, la longueur d'onde qui correspond à **1.42 eV** est **0.873  $\mu\text{m}$** .

La Figure 1.10 permet de visualiser le concept d'absorption de la lumière. Quand la lumière a une énergie supérieure à **1.1 eV**, le silicium génère de l'électricité. La lumière d'énergie inférieure à **1.1 eV** est inutilisable. De même pour l'arséniure de gallium, une lumière d'énergie supérieure à **1.43 eV** excite ses électrons de la couche extérieure.

Et enfin, l'arséniure de gallium aluminium requiert une lumière d'énergie supérieure à **1.7 eV**.



**Figure 1.10** : Effet de l'énergie de la lumière sur différentes bandes interdites  $E_g$  [21].

### 1.7.5 Principe de fonctionnement d'une cellule solaire

L'effet photovoltaïque utilisé dans les cellules solaires permet de convertir directement l'énergie lumineuse des rayons solaires en électricité par le biais de la production et du transport dans un matériau semi-conducteur des charges électriques positives et négatives sous l'effet de la lumière.

Ce matériau comporte deux parties, l'une présentant un excès d'électrons et l'autre un déficit en électrons, dites respectivement dopée de type **N** et dopée de type **P**.

Lorsque la première est mise en contact avec la seconde, les électrons en excès dans le matériau **N** diffusent dans le matériau **P**. La zone initialement dopée **N** devient chargée positivement, et la zone initialement dopée **P** devient chargée négativement. Il se crée donc entre elles un champ électrique qui tend à repousser les électrons dans la zone **N** et les trous vers la zone **P**.

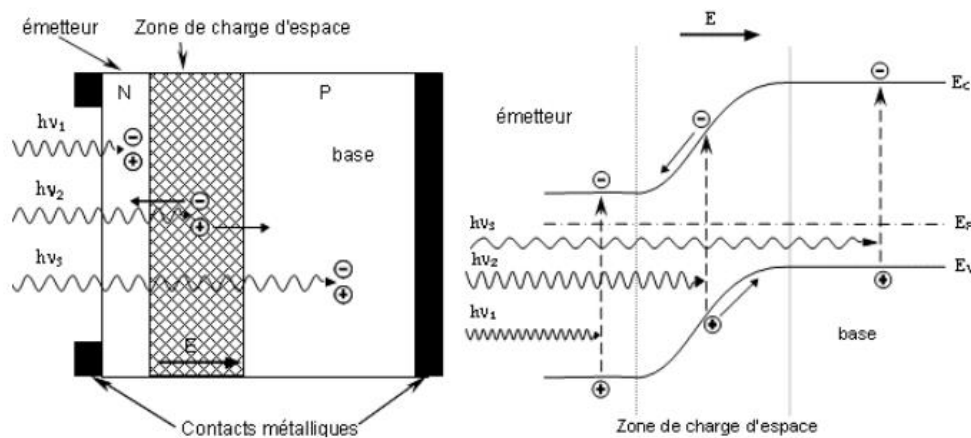
Une jonction **PN** est donc formée. En ajoutant des contacts métalliques sur les zones **N** et **P**, une diode est obtenue. Lorsque la jonction est éclairée, les photons d'énergie égale ou supérieure à la largeur de la bande interdite cèdent leur énergie aux atomes, chacun fait passer un électron de la bande de valence dans la bande de conduction et laisse aussi un trou capable de se mouvoir, engendrant ainsi une paire électron-trou.

Si une charge est placée aux bornes de la cellule, les électrons de la zone **N** rejoignent les trous de la zone **P** via la connexion extérieure, donnant naissance à une différence de potentiel et un courant électrique circule.

Le principe de fonctionnement d'une cellule solaire est illustré sur la Figure 1.11 [22].

Les photons incidents créent des porteurs dans les régions **N**, **P** et la zone de charge d'espace

Le comportement de ces porteurs libres diffère suivant le lieu de leur création. Dans les zones électriquement neutres **P** et **N**, les photo porteurs minoritaires diffusent.



**Figure 1.11** :structure( gauche) et diagramme de bande (droite) d'une cellule photovoltaïque[22].

Ceux qui atteignent la région de charge d'espace sont propulsés par le champ électrique vers la région où ils deviennent majoritaires. Ces photo porteurs contribuent donc au courant par leur diffusion, ils créent un photo courant de diffusion.

Dans la zone de charge d'espace, les paires électrons trous créés par les photons sont dissociées par le champ électrique, l'électron est propulsé vers la région de type *N* et le trou vers la région de type *P*.

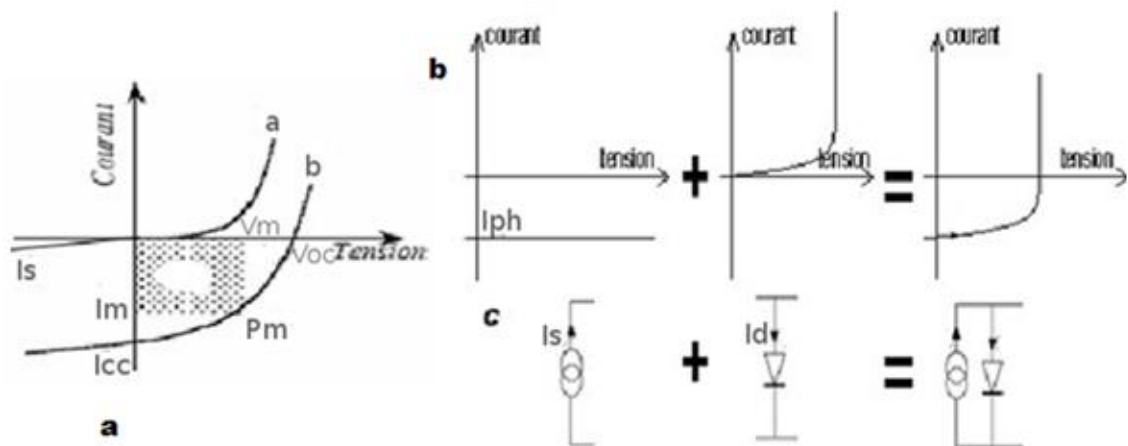
Les porteurs donnent naissance à un photo courant de génération. Ces deux contributions s'ajoutent pour créer un photo courant résultant  $I_{ph}$  qui contribue au courant inverse de la diode.

### 1.7.6 Caractérisation physique des cellules photovoltaïques

#### a. Caractéristique courant/tension et schéma équivalent

Les Figures 1.12 représentent une caractéristique courant-tension d'une cellule photovoltaïque.

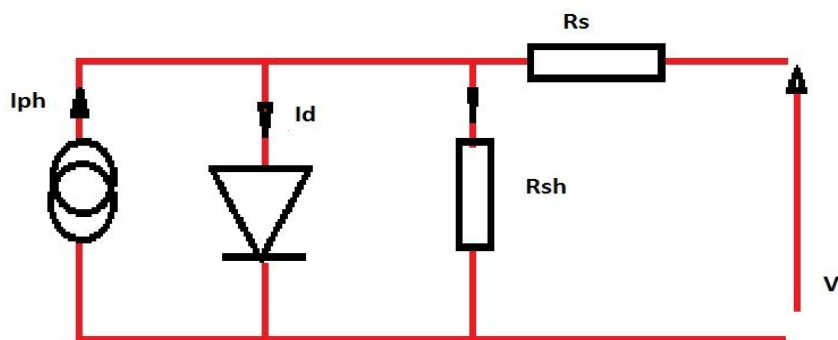
Selon la convention de signe usuelle, le photo courant peut-être assimilé dans le cas d'une cellule solaire idéale à une source de courant dirigée dans le sens opposé de la caractéristique de la diode dans le noir, ainsi qu'il est montré dans le schéma c de la Figure 1.12 [23].



**Figure 1.12:** Caractéristique courant/tension d'une cellule PV [23]

a) obscurité      b) sous éclairnement

c) schéma équivalent d'une cellule solaire idéale sous illumination.



**Figure 1.13** : Schéma équivalent d'une cellule [23].

Pour une cellule solaire non éclairée et polarisée par une tension  $V$ , la courbe obéit à l'équation de Shockly suivante [23] :

$$I_d = I_s \left[ \exp\left(\frac{qV}{nKT}\right) - 1 \right] \quad 1.14$$

où

- $I_s$  : courant de saturation
- $q$  : charge de l'électron
- $K$  : constante de Boltzmann
- $T$  : température
- $n$  : facteur d'idéalité de la diode ; tient compte des recombinaisons (dans le cas idéal, il est égale à 1).

Sous éclairement, un courant supplémentaire inverse  $I_{ph}$  vient s'ajouter [il tient compte du photocourant ( $I_{ph} < 0$ )] :

$$I = I_s \left[ \exp\left(\frac{qV}{nKT}\right) - 1 \right] - I_{ph} \quad 1.15$$

On peut voir clairement dans la Figure 1.12 que dans l'obscurité total, la caractéristique  $I(V)$  passe par l'origine, tandis que ce n'est pas le cas en présence d'un rayonnement lumineux.

Dans le cas réel, des résistances de contacts (résistivité des électrodes et des interfaces métal matériaux organiques) et des pertes ohmiques (dues à la résistivité des couches

organiques) ainsi que des courants de fuite (des courants de court-circuit) apparaissent à travers la cellule.

La figure 1.13 représente le schéma équivalent d'une cellule PV réelle.

$R_s$  est une résistance série liée à la résistivité volumique et à l'impédance des électrodes et des matériaux. Elle représente l'inverse de la pente de la courbe courant tension au point  $V_{co}$ .

$R_{sh}$  est une résistance shunt, également connue sous le nom de court-circuit, elle peut être due à un court-circuit sur les bords de la cellule. On l'appelle aussi résistance de fuite.

### 1.7.7 Paramètres des cellules photovoltaïques

Les paramètres des cellules photovoltaïques ( $I_{cc}$ ,  $V_{co}$ , FF et  $\eta$ ), extraits des caractéristiques courant-tension, permettent de comparer différentes cellules éclairées dans des conditions identiques.

Ces paramètres sont définies comme suit [23] :

#### a. Courant de court-circuit $I_{cc}$

Il s'agit du courant lorsque le potentiel à la cellule est nul. C'est le plus grand courant que la cellule peut fournir. Celui-ci fonction de la température, de la longueur d'onde du rayonnement, de la surface active de la cellule, de la mobilité des porteurs. Ce courant est linéairement dépendant de l'intensité lumineuse reçue.

#### b. Tension de circuit ouvert $V_{co}$

comme son nom l'indique, c'est la tension aux bornes de la cellule lorsqu'elle n'est pas connectée à une charge ou lorsqu'elle est connectée à une charge de résistance infinie. Elle dépend essentiellement du type de cellule solaire (jonction PN, jonction schottky), des matériaux de la couche active et de la nature des contacts de la couche active-électrode. Elle dépend de plus de l'éclairement de la cellule[23].

On peut facilement avoir l'expression de  $V_{co}$  dans le cas d'un courant nul à partir de l'expression :

$$V_{co} = \frac{KT}{q} \ln\left(\frac{I_{ph}}{I_s} + 1\right) \quad 1.16$$

$\frac{KT}{q}$  : potentiel thermodynamique

T : température absolue

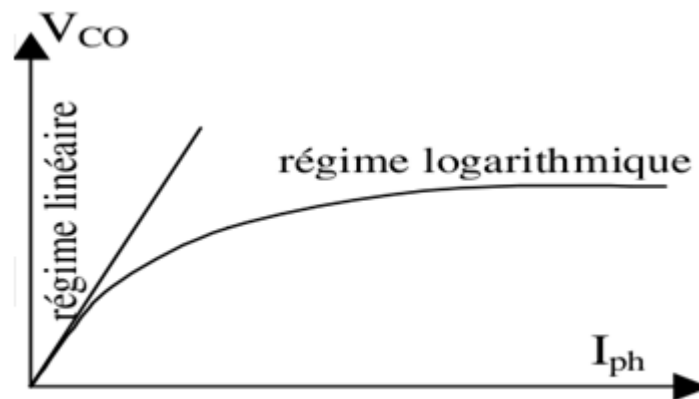
q : constante de charge d'électron

K : constante de Boltzmann

$I_{ph}$  : courant photonique

$I_s$  : courant de saturation

Deux régimes peuvent être observés suivant le degré d'éclairement (Figure 1.14) :



**Figure 1.14** : Différents régimes selon la puissance d'éclairement.

- Régime de faibles flux lumineux : dans ce cas,  $I_{ph} \ll I_s$ , ce qui permet d'écrire :

$$\ln\left(\frac{I_{ph}}{I_s} + 1\right) \cong \frac{I_{ph}}{I_s} \quad 1.17$$

D'où  $V_{co} = \frac{KT}{q} * \frac{I_{ph}}{I_s}$  : c'est la zone de comportement linéaire de la cellule.

- Régime des flux lumineux suffisamment intenses pour que  $I_{ph} \gg I_s$ , soit  $\frac{I_{ph}}{I_s} \gg$

1

D'où :  $V_{co} = \frac{KT}{q} \ln \frac{I_{ph}}{I_s}$  : c'est le domaine du comportement logarithmique.

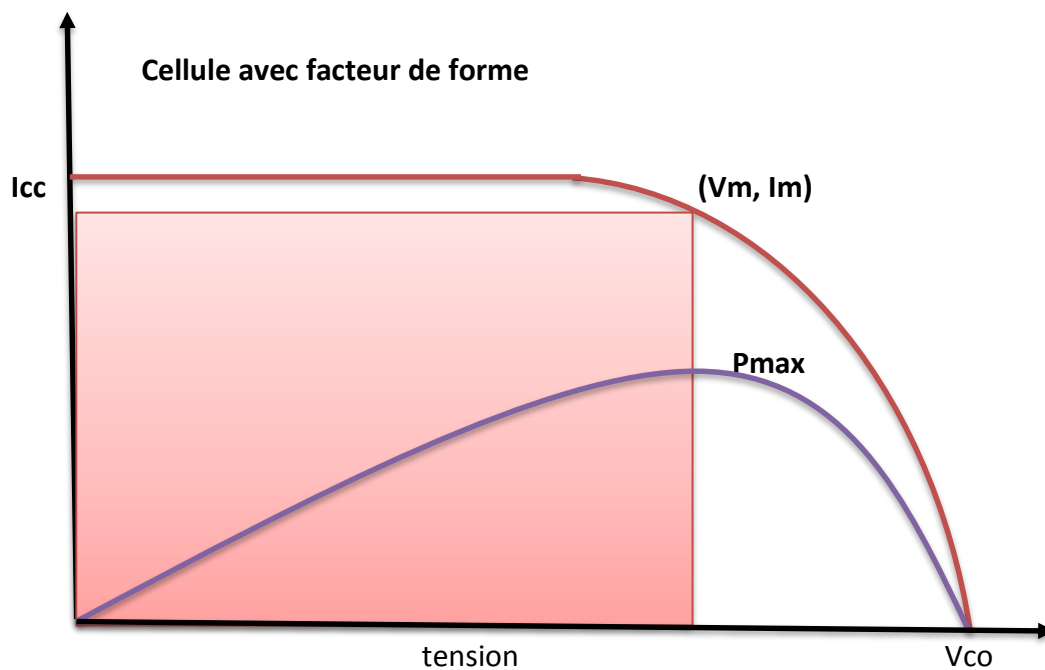
### c. Facteur de forme FF

La puissance fournie au circuit extérieur par une cellule photovoltaïque sous éclairement dépend de la résistance de charge. Cette puissance est maximale (notée  $P_{max}$ ) pour un point de fonctionnement  $P_m(I_m, V_m)$  de la courbe courant-tension (courant compris entre 0 et  $I_{cc}$  et tension comprise entre (0 et  $V_{co}$ ) (Figure 1.15).

On peut définir le facteur de remplissage ou facteur de forme **FF** par la relation suivante :

$$FF = \frac{P_m}{V_{co} \cdot I_{cc}} = \frac{V_m \cdot I_m}{V_{co} \cdot I_{cc}} \quad 1.18$$

On voit bien qu'il dérive de la représentation graphique (Figure 1.15) et est égal au rapport de la surface du rectangle  $P_{max}$  sur celle du rectangle dont les côtés mesurent  $V_{co}$  et  $I_{cc}$ .



**Figure 1.15** : Le facteur de forme dans la courbe I-V [24].

#### d. Le rendement $\eta$

Le rendement énergétique est défini quant à lui comme le rapport entre cette puissance maximale produite et la puissance du rayonnement solaire qui arrive sur le module photovoltaïque.

Si  $S$  est la surface de ce module,  $E$  l'éclairement en  $W/m^2$ , le rendement énergétique s'écrit :

$$\eta = \frac{P_m}{P_{in}} = \frac{FF \cdot I_{cc} \cdot V_{co}}{E \cdot S} \quad 1.19$$

Avec  $P_{in}$  la puissance lumineuse incidente.

Ce rendement peut être optimisé en augmentant le facteur de forme, le courant de court-circuit et la tension à circuit ouvert. C'est un paramètre essentiel, car la seule connaissance de sa valeur permet d'évaluer les performances de la cellule.

## **1.8 Conclusion :**

Dans ce chapitre nous avons rappelé quelques notions fondamentales concernant les semi-conducteurs comme : l'énergie de gap, le dopage, la structure cristalline ainsi que les propriétés optique et électrique.

Après nous avons rappelé quelques notions de base relatives au rayonnement solaire, tels que le spectre solaire, l'air mass.

Nous avons aussi décrit la cellule solaire, ses différents constituants, ses différents paramètres électriques (rendement, facteur de forme, le courant de court-circuit, ...) et les expressions de base qui permettant la génération du photo-courant.



# Chapitre 2 résultats et discussions

---

## 2.1 Introduction :

Les composés alliages semi-conducteurs avec une grande variation d'électronégativités, souvent appelés alliages hautement incompatibles, possèdent des changements spectaculaires dans les propriétés électroniques et optiques, avec des concentrations seulement en petits alliages.

Les alliages à hautes dépareillées de GaAsBi et GaAsN ont reçu beaucoup d'attention en raison de leur vaste gamme d'énergie de gap réalisable.

L'alliage GaAsN avec le contenu d'azote dilué a démontré des matériaux avec des propriétés de bande interdite étroites désirées [25], résultant du décalage de la limite de bande de conduction par rapport à GaAs [26].

L'alliage GaAsBi propose de la même façon un moyen de décaler la largeur de bande interdite par rapport GaAs [27], principalement par la modification de la bande de valence.

Ce chapitre porte sur la diminution de l'énergie de la bande interdite des alliages GaAsN et GaAsBi avec l'incorporation d'azote et du bismuth. Nous allons étudier l'influence de l'incorporation de l'azote et du bismuth sur les caractéristiques de la structure GaAsN/GaAs et GaAsBi/GaAs : paramètres de maille, le gap, la contrainte, épaisseur critique, le coefficient d'absorption, le coefficient de réflexion et l'indice de réfraction.

Par la suite, nous nous focaliserons sur la simulation et les résultats obtenus pour les différents paramètres de la cellule photovoltaïque à base de  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$  /GaAs : (L'efficacité quantique externe, caractéristique courant-tension, puissance...) et l'effet des boîtes quantiques sur cette structure.

## 2.2 Paramètres électroniques

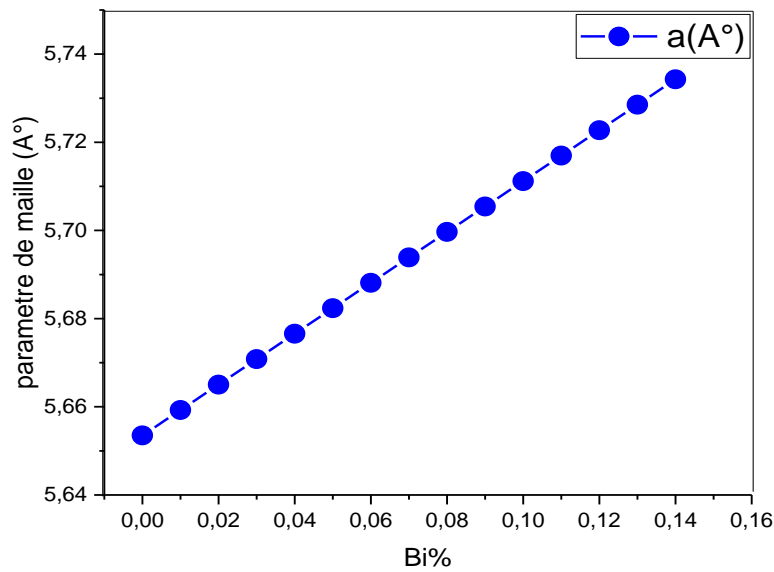
### 2.2.1 Paramètre de maille

Les figures 2.1 et 2.2 représentent la variation des paramètres de maille en fonction de la concentration de bismuth et de l'azote de l'alliage GaAsBi et GaAsN respectivement (équation 1.5).

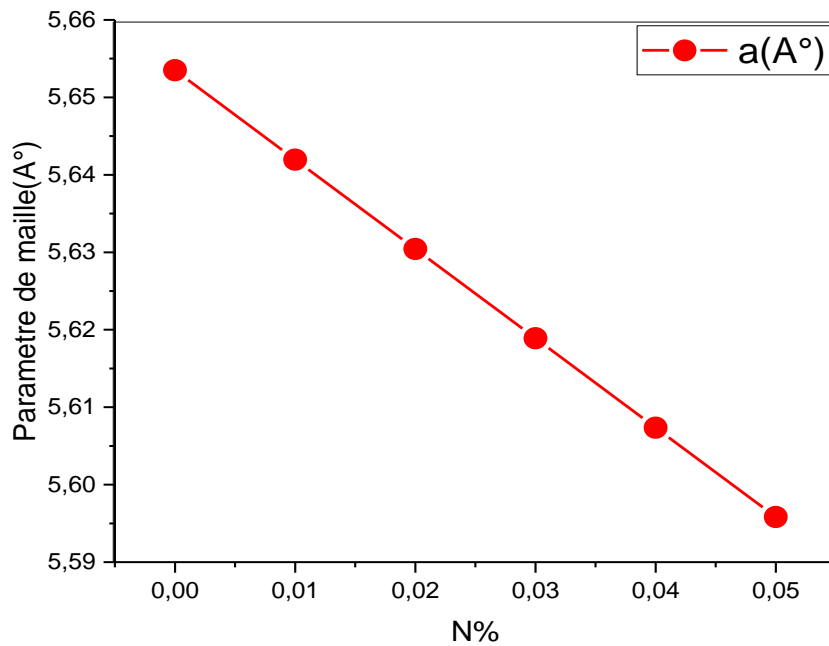
Nous pouvons voir que le Bismuth a pour effet d'augmenter le paramètre de maille, et l'Azote le diminuer.

Par exemple pour Bi=1% on a  $a=5,65 \text{ \AA}$  si on augmente Bi à 15% on a une valeur de  $5,74 \text{ \AA}$ .

Et pour N=1% on a  $a=5,65 \text{ \AA}$  si on augmente N à 5% on a une valeur de  $5,59 \text{ \AA}$ .



**Figure 2.1** Variation du paramètre de maille du  $\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x$  en fonction de la concentration du bismuth ;



**Figure 2.2** Variation du paramètre de maille du  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$  en fonction de la concentration de l'azote.

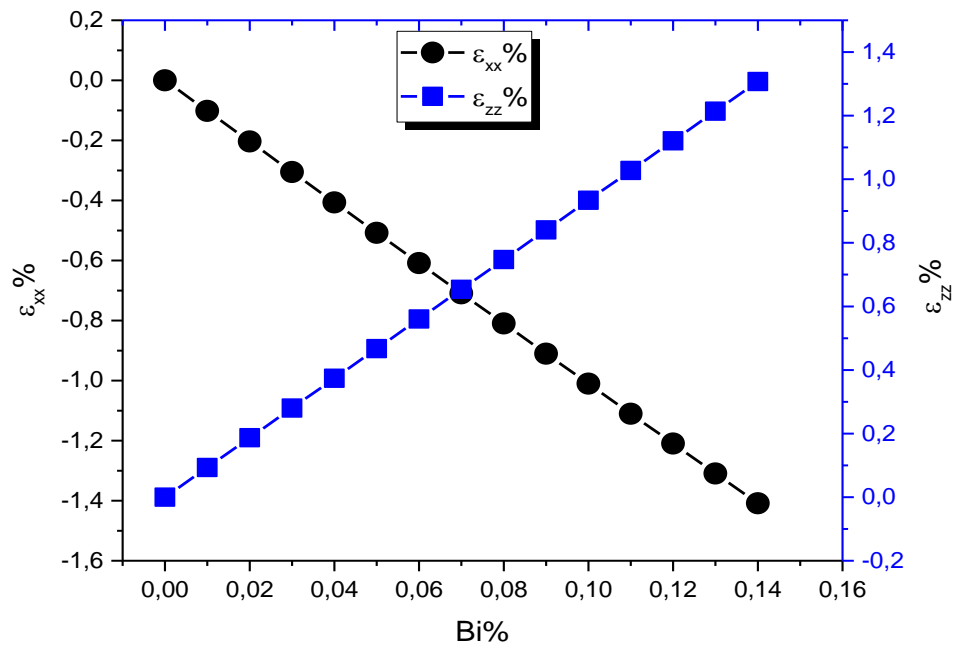
### 2.2.2 L'Effet de la contrainte

Sur la figure **2.3** et **2.4**, nous avons représenté la variation du désaccord de maille en fonction de la concentration de bismuth et d'azote respectivement (équation **1.6,1.7**).

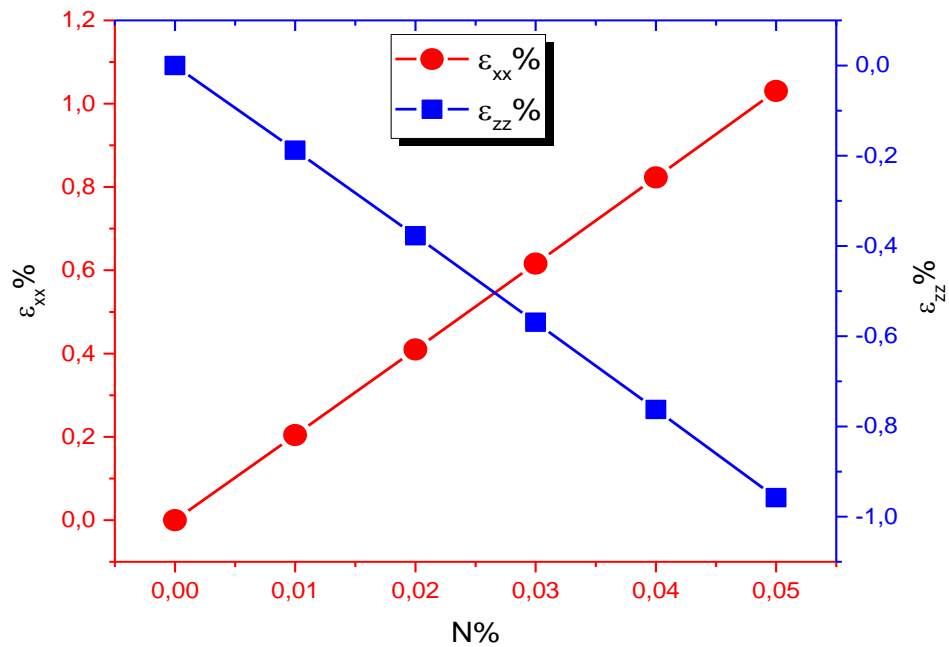
Nous pouvons observer sur la figure **2.3** que la déformation biaxiale  $\epsilon_{xx}$  diminue avec l'augmentation de bismuth, par contre la déformation uniaxiale  $\epsilon_{zz}$  augmente.

Et pour la figure **2.4** on remarque que la déformation biaxiale  $\epsilon_{xx}$  augmente avec l'augmentation d'azote, par contre la déformation uniaxiale  $\epsilon_{zz}$  diminue.

Alors on constate d'après l'équation **1.6** et la figure **1.4** que le matériau  $\text{GaAsBi}$  soumise à une contrainte tensile mais le  $\text{GaAsN}$  à une contrainte compressive.



**Figure 2.3** Variation du désaccord de maille en fonction de la concentration du bismuth.

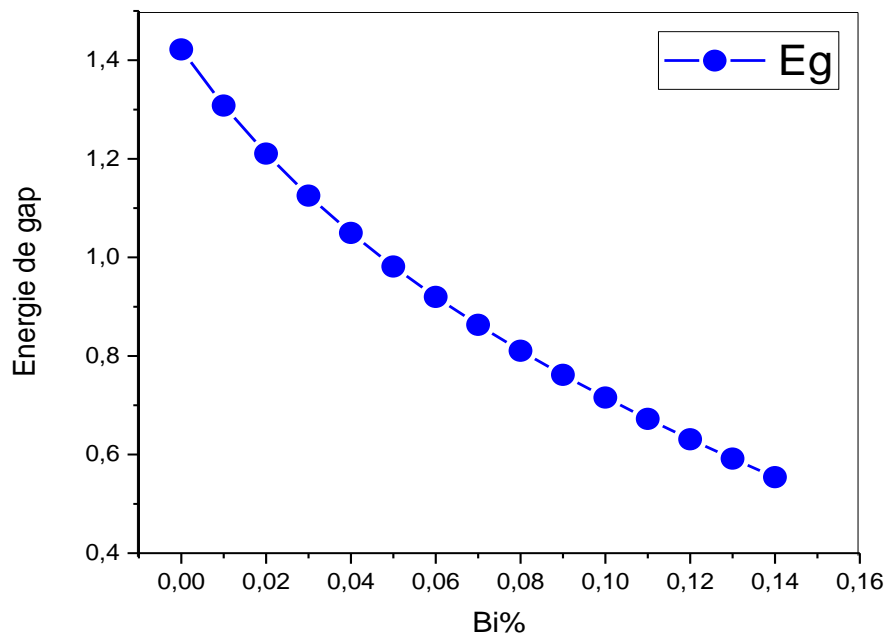


**Figure 2.4** Variation du désaccord de maille en fonction de la concentration de l'azote.

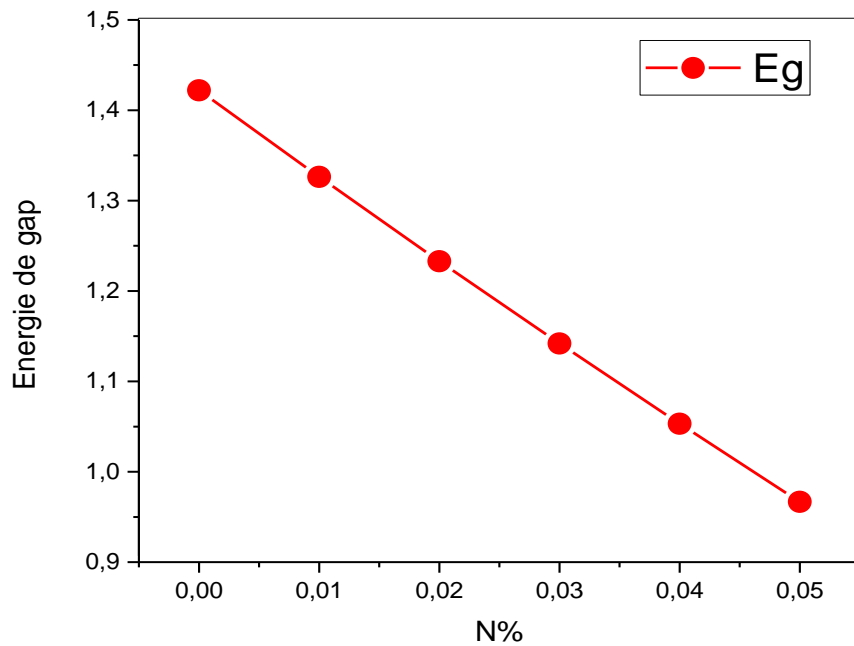
### 2.2.3 L'énergie de bande interdite

Sur la figure 2.5 et 2.6 est illustrée la variation du gap  $E_g$  en fonction de la concentration de bismuth et d'azote (équation 1.9).

Pour le  $\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x$  le gap diminue avec la concentration de Bi, et varie de 1.42 jusqu'à 0,7 eV. Et pour le  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$  le gap diminue avec la concentration de N, et varie de 1.42 jusqu'à 0.96 eV. Alors on a pour le  $\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x$  une diminution de  $\Delta E_g = 0,72 \text{ eV}$  et pour le  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$  une diminution de  $\Delta E_g = 0,46 \text{ eV}$ .



**Figure 2.5** Variation d'énergie de gap du  $\text{GaAs}_{1-x}\text{Bi}_x$  en fonction de la concentration du bismuth.



**Figure 2.6** Variation d'énergie de gap du  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$  en fonction de la concentration de l'azote.

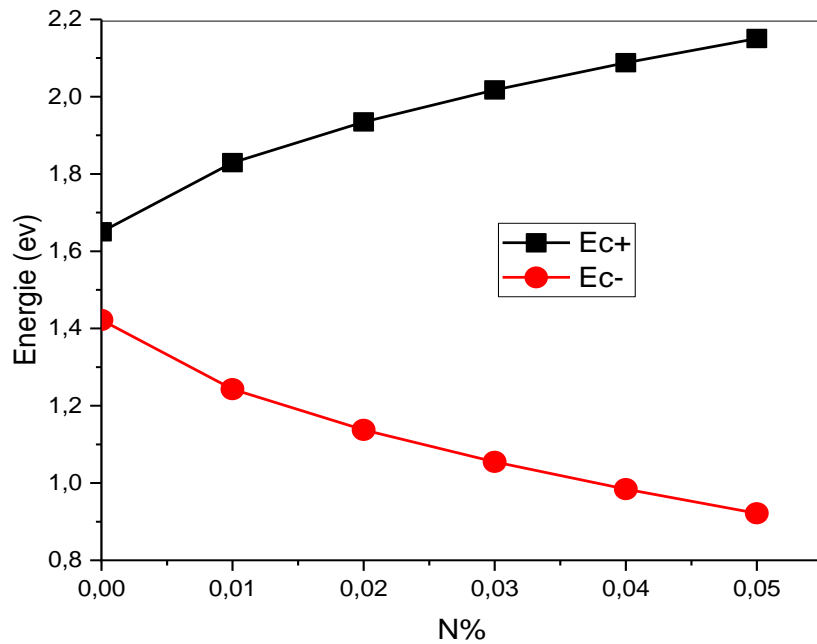
**a. Effet de l'azote sur la bande de conduction**

Dans la figure **2.7** nous présentons la variation de l'énergie de la bande interdite de la structure GaAsN à l'issue de l'éclatement ( $E_c^+$ ,  $E_c^-$ ) en fonction des fractions d'azote.

Nous pouvons voir que la bande de conduction divisée en deux sous bandes, a une énergie qui dépend de la concentration d'azote ; plus celle-ci augmente plus les deux sous niveaux se repoussent.

On a pour  $N=1\%$   $E_c^+=1,65$  eV et  $E_c^-=1,42$  eV si on augmente  $N$  à  $5\%$  on a  $E_c^+=0,9$  eV et  $E_c^-=2,18$  eV.

Alors on a une augmentation de  $\Delta E_c^+=0,65$  eV et une diminution de  $\Delta E_c^-=0,76$  eV.



**Figure 2.7** : variation de l'énergie de la bande interdite en fonction du pourcentage d'azote.

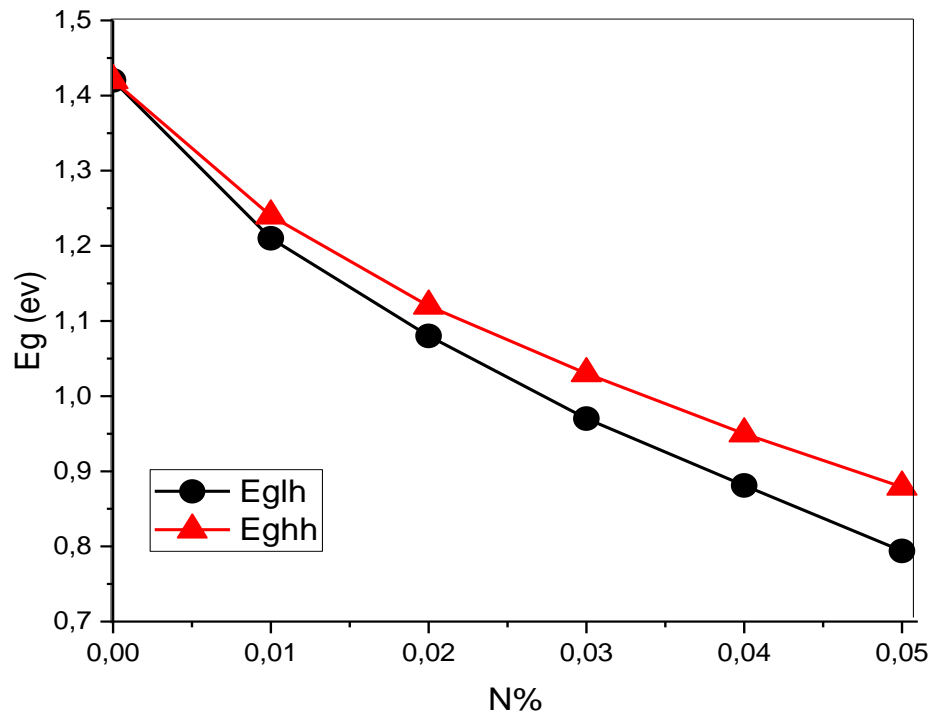
### b. L'énergie de bande interdite contrainte

La figure 2.8 présente la variation de l'énergie de gap contraint avec éclatement ( $E_{ghh}, E_{glh}$ ) en fonction des fractions d'azote.

On constate que pour une contrainte extensive l'énergie de la bande interdite des trous lourds est grande par rapport à l'énergie de la bande interdite des trous légers.

Par exemple pour  $N=0\%$  on a  $E_{ghh} = E_{glh} = E_{gGaAs} = 1,42$  eV si on augmente la concentration de N a 5% on a  $E_{ghh} = 0,75$  eV et  $E_{glh} = 0,85$  eV.

On conclure que la contrainte diminue l'énergie de gap pour les trous légers et les trous lourds.



**Figure 2.8** : variation de l'énergie de gap contraint avec éclatement ( $E_{ghh}, E_{glh}$ ) de la structure GaAsN en fonction des fractions d'azote.

### 2.2.4 Epaisseur critique

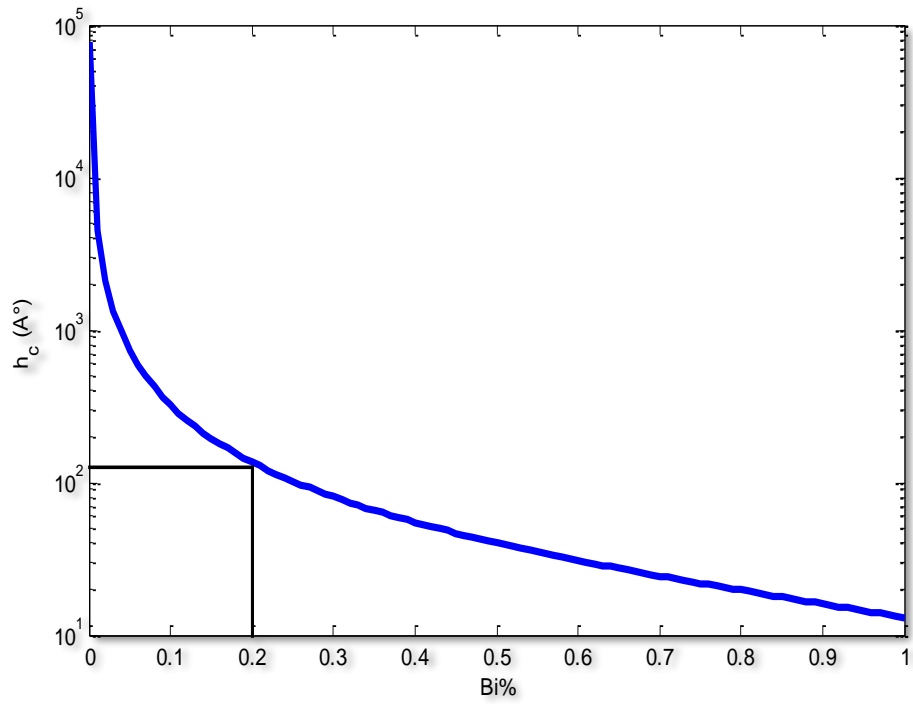
Les figures **2.9** et **2.10** représente la variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration du bismuth et d'azote respectivement (**équation 1.8**).

On remarque que l'épaisseur critique est diminuée dans les deux graphes.

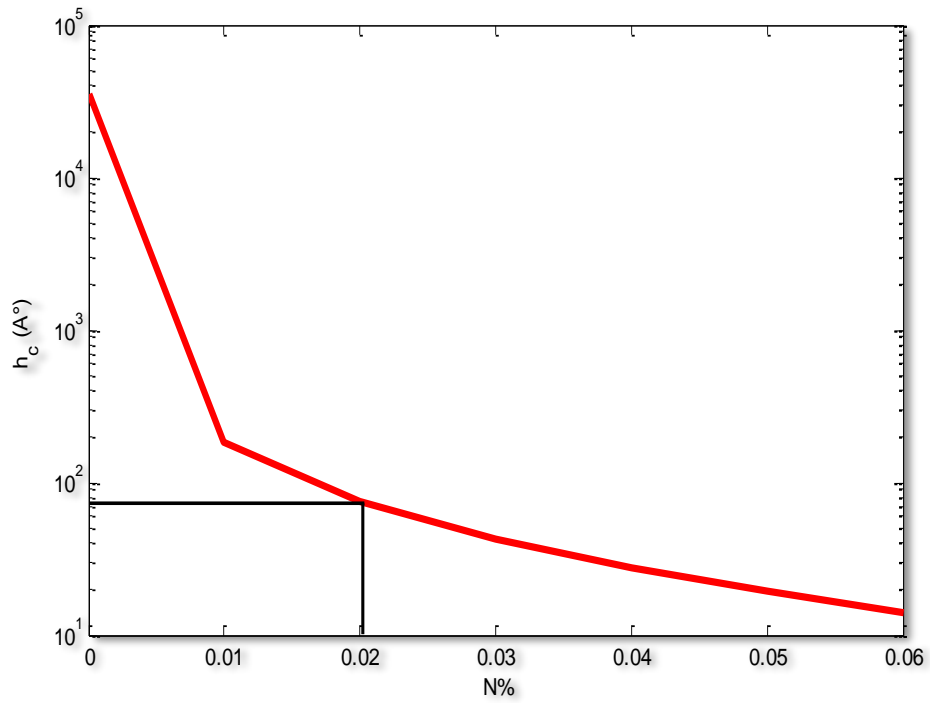
Par exemple pour N=2% on a une épaisseur critique de 75 Å si on change la valeur de N=4% on à  $h_c=50$  Å alors on a une diminution de  $\Delta h_c=20$  Å.

Pour Bi=20% on a une épaisseur critique de 110 Å si on change la valeur de Bi=40% on a  $h_c=60$  Å alors on a une diminution de  $\Delta h_c=50$  Å.





**Figure 2.9** Variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration du bismuth.



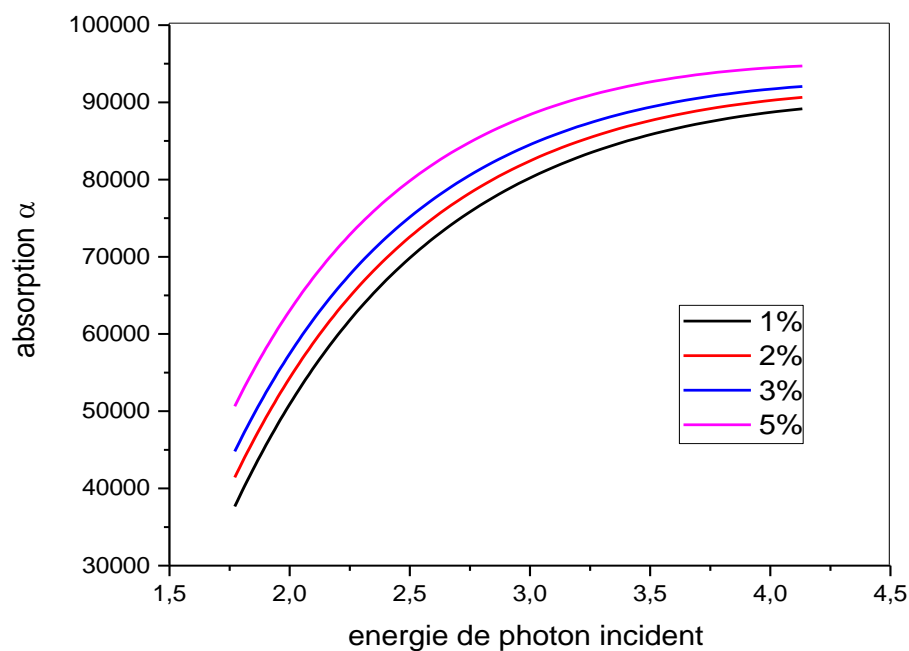
**Figure 2.10** Variation de l'épaisseur critique en fonction de concentration d'azote.

## 2.3 Propriétés optiques

### 2.3.1 Le coefficient d'absorption

Sur la figure 2.11, nous avons représenté la variation du coefficient d'absorption  $\alpha$  en fonction de l'énergie des photons incidents pour différentes valeurs de la concentration d'azote  $x$  (équation 1.4). Le coefficient d'absorption augmente avec l'énergie de photon. Pour une énergie de photon donnée,  $\alpha$  augmente avec la concentration d'azote  $x$  (faibles gaps). Par exemple pour  $N=1\%$  on a une augmentation de  $38 \cdot 10^3$  à  $88 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-1}$  pour des énergies de photon varie de 1,75 eV à 4,2 eV.

Pour une énergie de photon égale à 1,75 eV on a une augmentation d'absorption de  $38 \cdot 10^3$  à  $50 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-1}$  pour différentes concentrations d'azote.



**Figure 2.11** Variation du coefficient d'absorption  $\alpha$  en fonction de l'énergie de photon Incident E.

### 2.3.2 Indice de réfraction

La figure 2.12 représente la variation de l'indice de réfraction  $n$  en fonction de la longueur d'onde pour différentes valeurs de la concentration d'azote  $x$  (équation 1.2).

L'indice de réfraction diminue avec la longueur d'onde. Pour une longueur d'onde donnée,  $n$  diminue avec la concentration d'azote  $x$ . Par exemple pour  $\lambda$  varie de 0,3  $\mu\text{m}$  à 0,6  $\mu\text{m}$  on a  $n_1=3,497$  et  $n_2=3,470$  pour une concentration d'azote  $N=4\%$  alors on a une diminution  $\Delta n=0,027$ . Et pour une longueur d'onde égale à 0,6  $\mu\text{m}$  l'indice de réfraction diminue de 3,493 à 3,478 pour différentes concentrations d'azote.

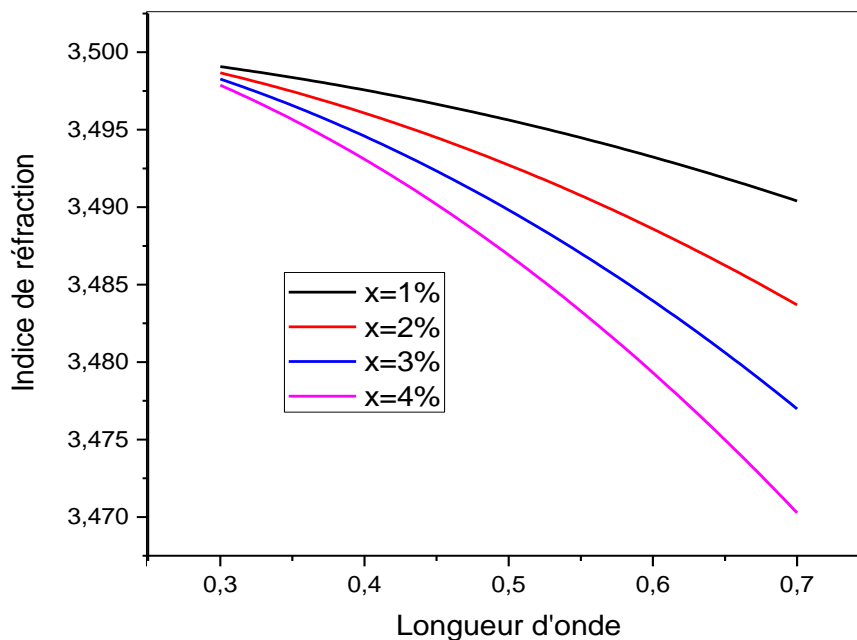
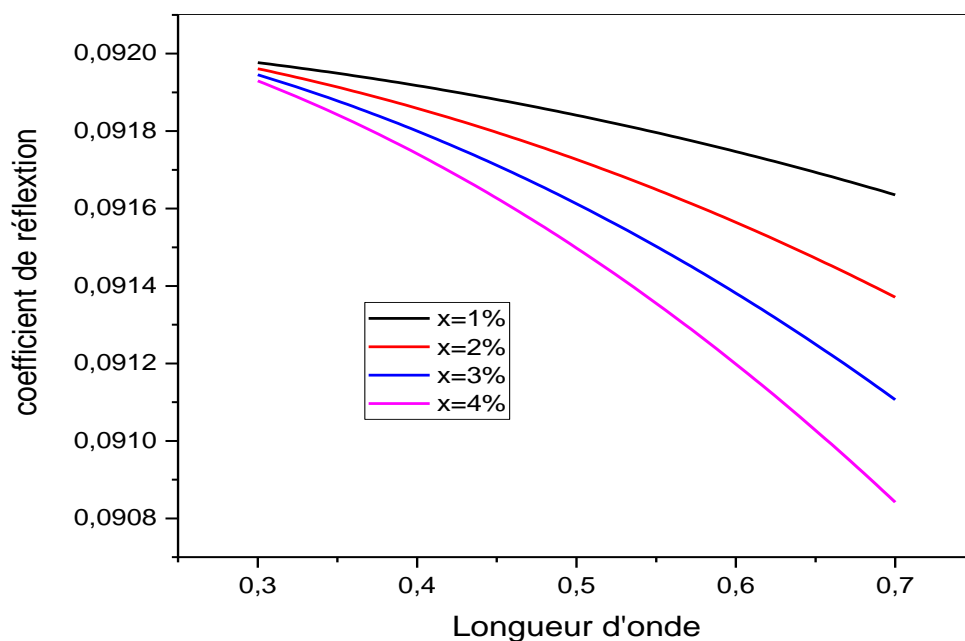


Figure 2.12 Variation de l'indice de réfraction en fonction de la longueur d'onde.

### 2.3.3 Coefficient de réflexion

La figure 2.13 présente la variation du coefficient de réflexion  $R$  en fonction de la longueur d'onde pour différentes valeurs de la concentration d'azote  $x$  (équation 1.3).

Le coefficient de réflexion présente des valeurs faibles de l'ordre de 0.09 pour des concentrations d'azote autour de 0.01 à 0.04, ce qui permet d'avoir une meilleure absorption de la lumière.



**Figure 2.13** Variation de Coefficient de réflexion en fonction de la longueur d'onde.

## 2.4 Différents paramètres de la cellule photovoltaïque pour le GaAsN

Les boîtes quantiques semi-conductrices sont des inclusions nanométriques tri-dimensionnelles d'un matériau de faible gap dans un autre matériau (la matrice) de gap plus élevé. Elles sont ainsi souvent considérées comme des « atomes artificiels », grâce à leurs tailles (quelques dizaines de nanomètres dans un semi-conducteur) [28].

Nous avons fixé le nombre de boites quantique (4 boites dans une couche) et on a varié le nombre de couches (10, 20,30 couches).

La figure **2.14** présente la structure GaAsN /GaAs avec 10 couches(Annexe A).

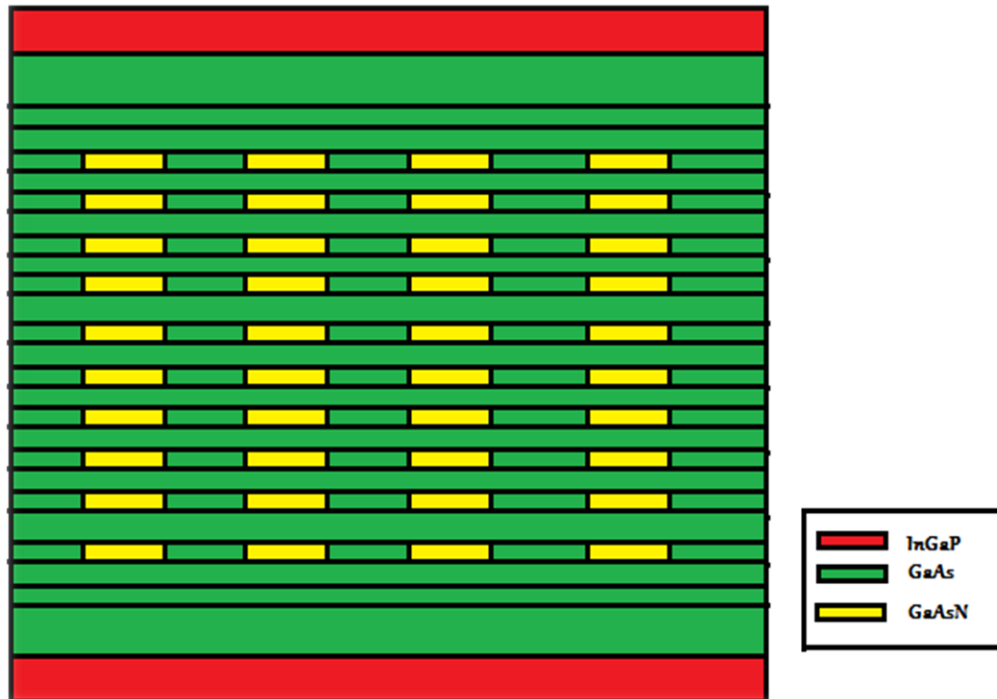
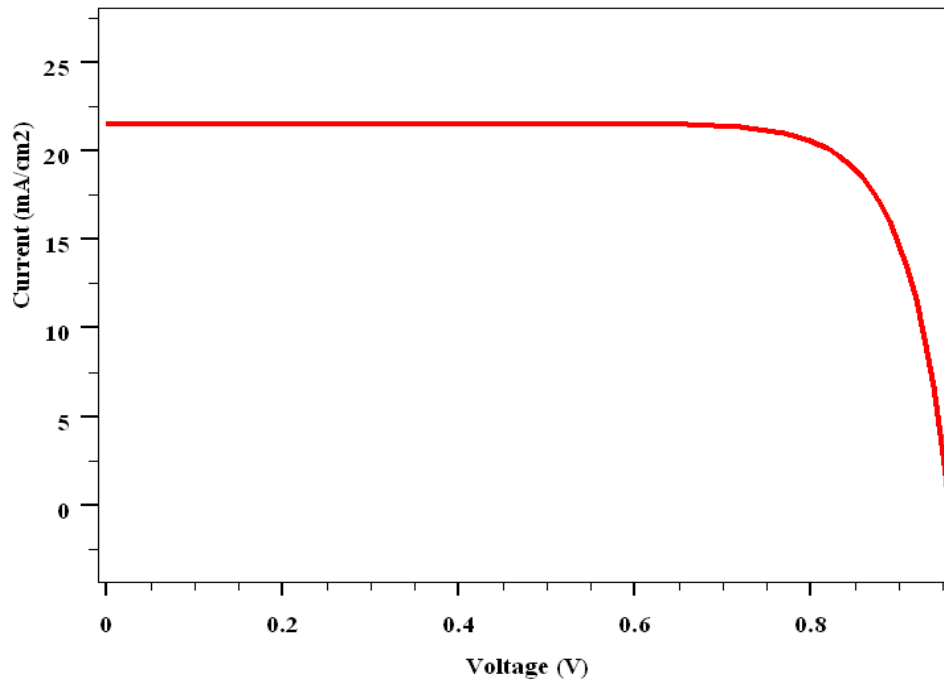


Figure 2.14 : structure  $\text{GaAs}_{0.95}\text{N}_{0.05}/\text{GaAs}$  a 10 couches QDs.

## 2.4.1 Caractéristiques courant-tension

### a. Caractéristiques $I(V)$ sans boîtes quantiques

Sur la figure 2.15 illustre l'évolution de la densité de courant en fonction de la tension. Nous pouvons voir que la densité de courant est stable 21.65 (mA/cm<sup>2</sup>) pour des valeurs de tension de 0 à 0.8 (V), après elle diminue.



**Figure 2.15** Caractéristiques courant-tension de la structure GaAs<sub>0.95</sub>N<sub>0.05</sub>.

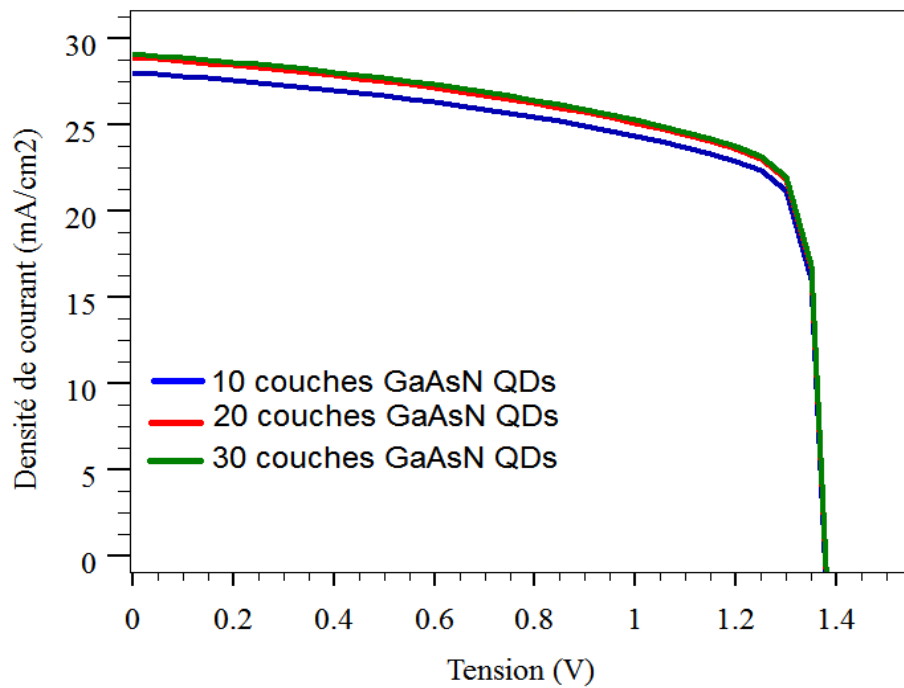
Le tableau 2.1 présente les différents paramètres de la cellule solaire sans boîtes quantiques.

<b>Jcc (mA/cm<sup>2</sup>)</b>	<b>21.65</b>
<b>Voc (Volt)</b>	<b>0.98</b>
<b>FF (%)</b>	<b>77.67</b>
<b>eff (%)</b>	<b>16.48</b>

**Tableau 2.1** différents paramètres de la cellule solaire sans QDs

### **b. Caractéristiques I(V) avec boîtes quantiques**

La figure 2.16 montre les caractéristiques I(V) pour chaque cellule solaire de la structure GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>. La densité de courant augmente de 28.0 à 29.09 mA/cm<sup>2</sup>, en augmentant le nombre des couches QDs de 10 à 30 pour une concentration d'azote égal à 5%.

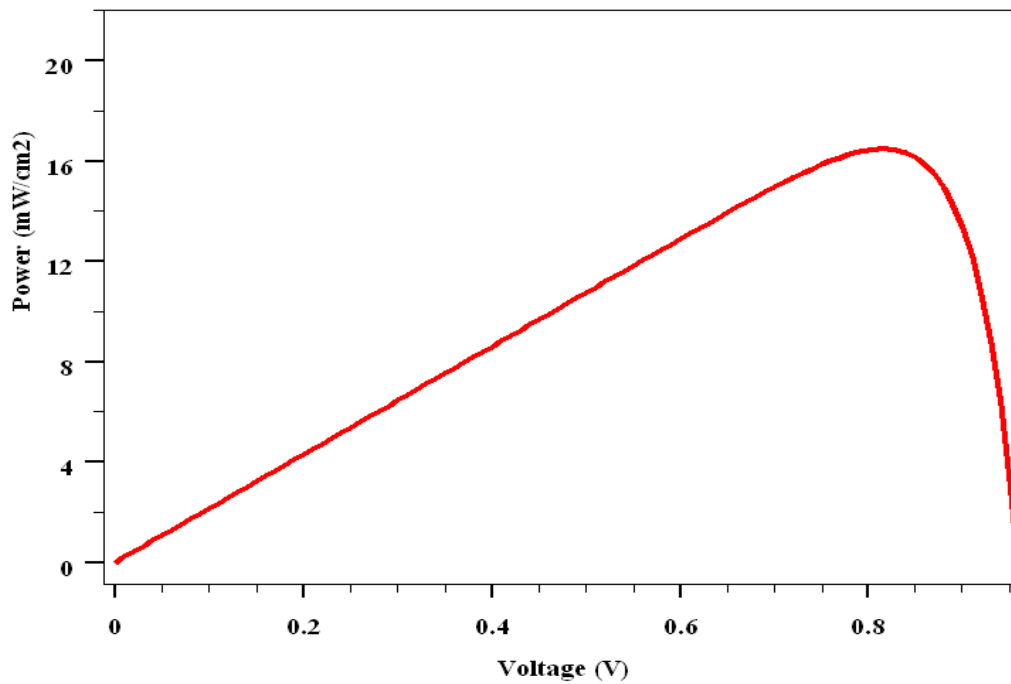


**Figure 2.16** Caractéristiques courant-tension de la structure GaAs<sub>0.95</sub>N<sub>0.05</sub> pour différentes couches QDs.

## 2.4.2 Puissance et puissance maximal délivrée

### a. Puissance et puissance maximal sans boîtes quantiques

La figure **2.17** représente la variation de la puissance délivrée en fonction de la tension pour une concentration d'azote  $x=0.05$ . Cette courbe montre la puissance maximale  $P_{\max} = 16$  (mW /cm<sup>2</sup>).



**Figure 2.17** Puissance délivrée par la cellule solaire en fonction de la tension.

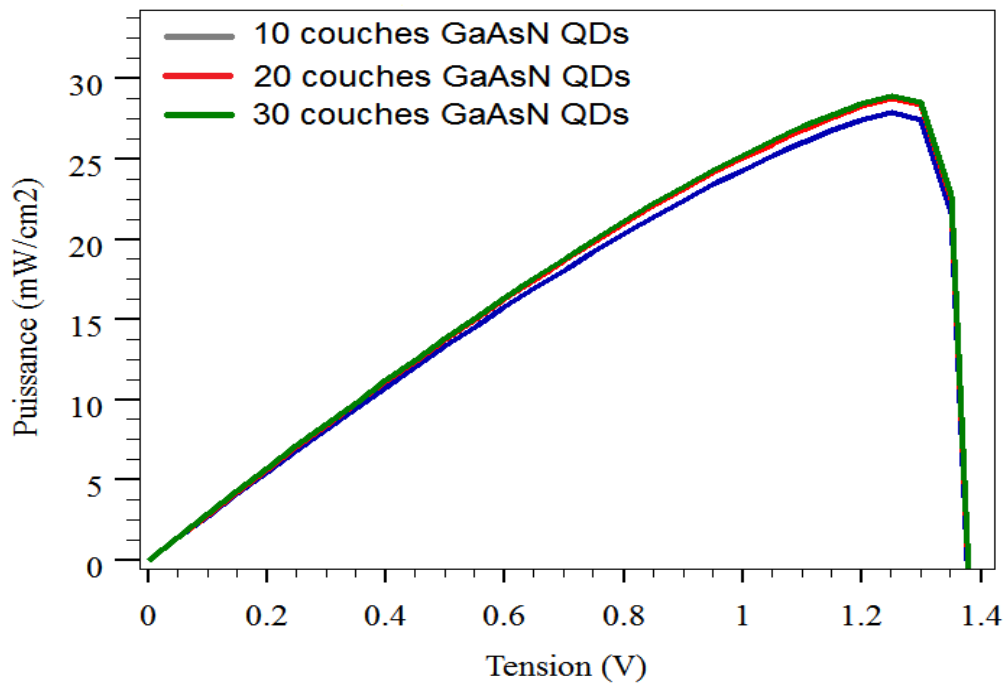
**b. Puissance et puissance maximal avec boîtes quantiques**

La figure **2.18** montre la puissance délivrée pour chaque cellule solaire de la structure GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>. Nous pouvons voir que la puissance maximale augmente, en augmentant le nombre des couches QDs de 10 à 30 pour une concentration d'azote égal à 5%.

Par exemple pour :

- 10 couches Qds on a une puissance maximum  $P_{max}=27,89(mW /cm^2)$
- 20 couches Qds on a une puissance maximum  $P_{max}=28,65(mW /cm^2)$
- 30 couches Qds on a une puissance maximum  $P_{max}=28,95(mW /cm^2)$





**Figure 2.18** Puissance délivrée par la cellule solaire en fonction de la tension pour différentes couches QDs.

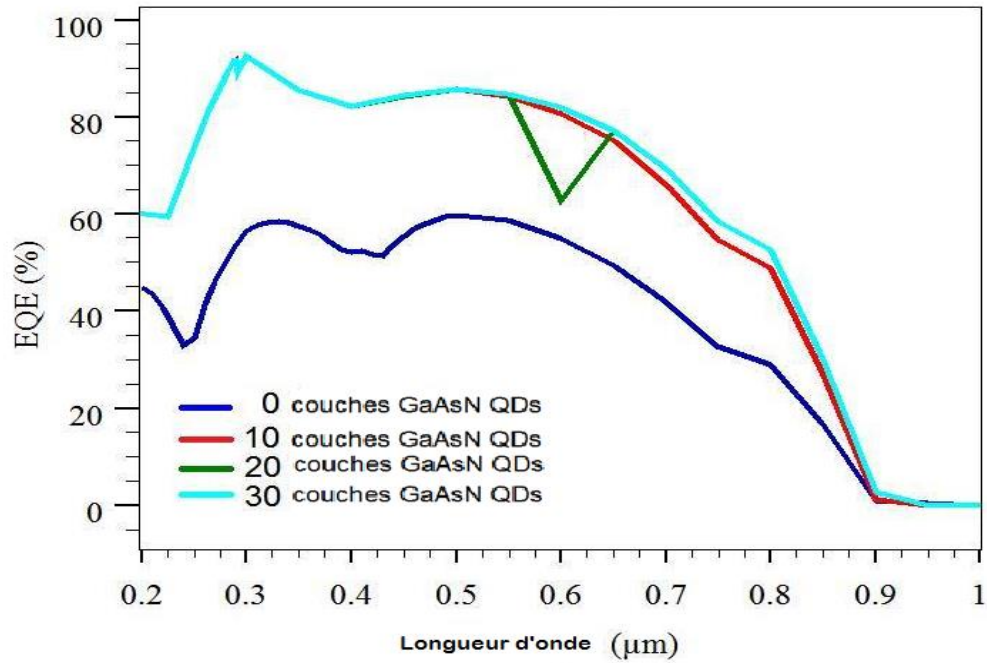
### 2.4.3 L'efficacité quantique externe

L'efficacité quantique externe définit comme le rapport entre le nombre d'électrons photogénérés et le nombre de photons incidents [29].

La figure 2.19 illustre la variation de l'efficacité quantique externe en fonction de fractions d'azote sans et avec boîtes quantiques.

On remarque que l'efficacité quantique externe sans utilisation des couches QDs égale à 45% mais avec couches QDs elle augmente jusqu'à 60% pour une longueur d'onde égale à  $0,2 \mu\text{m}$  on observe que on a un maximum de cette efficacité à  $0,3 \mu\text{m}$ .

Après on remarque une bonne efficacité dans l'intervalle  $[0,3 ; 0,6 \mu\text{m}]$  presque c'est l'intervalle de gamme des longueurs d'onde visibles après on observe une diminution rapide jusqu'à 0%.



**Figure 2.19** : variation de l'efficacité quantique externe en fonction de fractions d'azote sans et avec boîtes quantiques.

#### 2.4.4 Résultats final :

Le tableau 2.2 représente la variation des différents paramètres d'une cellule solaire sans et avec implémentation des boîtes quantiques.

On constate que si on augmente le nombre de boîtes quantiques :

- Le courant de court-circuit  $J_{cc}$  augmente.
- La tension en circuit ouvert  $V_{oc}$  augmente.
- Le rendement (eff%) augmente.

Effet du nombre de QDs ( $x=5\%$ )							
GaAsN/GaAs (0 QDs)		GaAsN/GaAs (40 QDs)		GaAsN/GaAs (80 QDs)		GaAsN/GaAs (120 QDs)	
Jcc (mA/cm <sup>2</sup> )	21.65	Jcc (mA/cm <sup>2</sup> )	28	Jcc (mA/cm <sup>2</sup> )	28.88	Jcc (mA/cm <sup>2</sup> )	29.09
Voc (Volt)	0.98	Voc (Volt)	1.376	Voc (Volt)	1.377	Voc (Volt)	1.377
FF (%)	77.67	FF (%)	72.34	FF (%)	72.04	FF (%)	72.24
eff (%)	16.48	eff (%)	27.89	eff (%)	28.65	eff (%)	28.95

**Tableau 2.2** : résultats finals de l'effet du nombre de QDs sur la structure GaAs<sub>0.95</sub>N<sub>0.05</sub>.

## 2.5 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons étudié les propriétés très particulières des matériaux GaAsBi et GaAsN. Nous avons aussi étudié l'effet de l'azote et de bismuth sur les différents paramètres électroniques et optiques.

Après nous avons établis la simulation des différents paramètres caractérisant la cellule solaire à base des matériaux GaAsN/GaAs et nous avons aboutis ces résultats :

- L'augmentation des couches QDs améliore la caractéristique courant-tension, d'où l'amélioration du courant court-circuit et de la puissance.
- La diminution du facteur de forme avec l'augmentation des couches QDs.
- Une bonne amélioration de rendement.

# Conclusion générale

---

Ce projet de fin d'étude porte sur la modélisation et l'optimisation des structures à base de GaAsN et GaAsBi pour le photovoltaïque et ceci à partir des différentes relations théoriques et des simulations faites sous le logiciel Silvaco.

L'accomplissement de ce projet a nécessité un plan de travail qui se résume comme suit : Le premier chapitre présente quelques généralités sur les semi-conducteurs en générale et les semi-conducteurs III-V en particulier ; par la suite des notions de base du photovoltaïque et les différents paramètres caractérisant les cellules solaires ont été définis.

Le deuxième chapitre consiste à l'étude des matériaux GaAsN et GaAsBi et l'influence des concentrations d'azote et du bismuth sur les différents paramètres physiques, électronique et optique de ce dernier.

Pour cela, une concentration d'azote variant entre 0 à 4% a été choisi afin d'éviter la dislocation. Il a été constaté que l'énergie de gap a diminué jusqu'à 0.966 eV pour confirmer la condition ( $h\nu > E_g$ ) que l'énergie de photon incident doit être plus grande que l'énergie de gap de notre matériau dans le but d'obtenir une bonne absorption.

Pour le calcul du contrainte nous avons utilisé le paramètre de maille, en effet la contrainte extensive augmente jusqu'à 1.03%.

Pour choisir la valeur qui confirme la condition  $h_c > L$ , nous avons calculé l'épaisseur critique qui est  $h_c=75\text{Å}$  pour  $x=0.02$ .

De même, une concentration du Bismuth variant entre 0 à 14% a été choisi afin d'éviter la dislocation. Il a été constaté que l'énergie de gap a diminué jusqu'à 0.55 eV.

Aussi le paramètre de maille a été utilisé afin de calculé la contrainte compressive qui a diminué jusqu'à -1.4%.

En effet, l'épaisseur critique calculé pour choisir la valeur qui confirme la condition

$h_c > L$  obtenu est de  $h_c=110\text{Å}$  pour  $x=0.2$ .

Enfin, nous avons effectué la simulation des différents paramètres qui concerne la cellule photovoltaïque à base de GaAsN/GaAs. En outre une interprétation des

résultats obtenus par cette simulation a été effectuée et nous avons pu enregistrer des rendements intéressants pour différentes couches QDS.

On a obtenu un rendement de 29% dans notre travaille avec l'utilisation de notre matériau et ces résultats sont plus élevé que le rendement de matériau essentiel utiliser dans les cellules solaires qui est le silicium avec un rendement moins d'un 16%.

Les perspectives de ce travail sont nombreuses, nous pensons qu'une structure pareille peut être utilisée plus tard pour :

- Des nanostructures comme les puits quantiques.
- Les nano fils, multi puits quantiques et le multi Junction.

## Annexe A

### A.1 c'est quoi boite quantique

Les boîtes quantiques semi-conductrices sont des inclusions nanométriques tri-dimensionnelles d'un matériau de faible gap dans un autre matériau (la matrice) de gap plus élevé. Elles sont ainsi souvent considérées comme des « atomes artificiels », grâce à leurs tailles (quelques dizaines de nanomètres dans un semi-conducteur) [28].

### A.2 le but de boite quantique

Le but de boite quantique (QDs), est d'aider les photons moins énergétiques d'être absorbés. L'implémentation des boites quantiques créent de Bande intermédiaire et donc augmenter le nombre de transition des électrons dans la cellule.

### A.3 Diagramme de bande pour pin-GaAs

Pour comprendre le phénomène de création des paires électrons-trous, nous avons schématisé les diagrammes des bandes simplifiés pour chaque structure. **La Figure A.1** illustre le diagramme de bande de l'homojonction GaAs. Les photo porteurs collectés dans ce cas, sont créés via les transitions bande à bande (bande de valence-bande de conduction). Les photons dont l'énergie est supérieure à l'énergie du gap vont perdre une partie de puissance sous forme d'énergie thermique. En effet, les électrons ainsi excités sont transférés par thermalisation vers le minimum absolu de la bande de conduction et peuvent ensuite participer aux phénomènes de conduction. Aussi, les photons d'énergies inférieures à l'énergie du gap du matériau de base sont transmis et perdus [30].

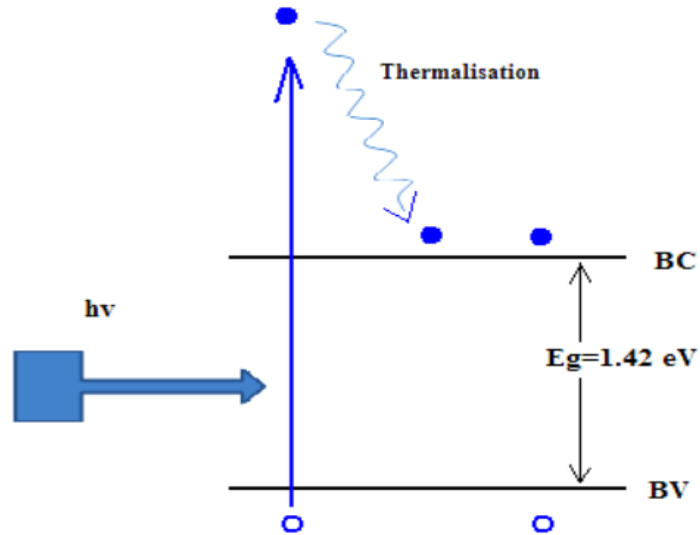


Figure A.1 diagramme de bande [30].

#### A.4 Diagramme de bande pour GaAsN/GaAs

Pour récupérer les photons de faibles énergies, il est nécessaire de créer des niveaux dans la bande interdite pour absorber les photons transmis. Dans ce cas, plusieurs niveaux d'énergies sont créés via des niveaux intermédiaires qui vont par la suite contribuer à la conduction pour les faibles énergies. La Figure A.2 représente le diagramme de bande simplifié après insertion de niveaux intermédiaires dans la bande interdite. Avec ce système a 4 niveaux, 4 nouvelles transitions sont ajoutées à la transition bande a bande [30].

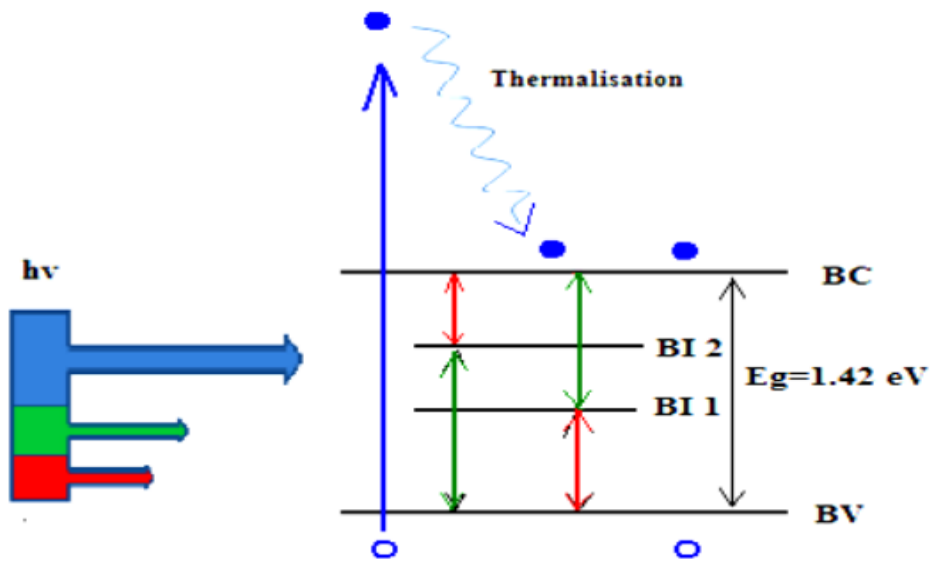


Figure A.2 diagramme de bande avec des niveaux intermédiaire [30].

## Annexe B

**TABLEAU PÉRIODIQUE DES ÉLÉMENTS**

Masse atomique → 55.845 26 ← Numéro atomique (nombre de protons dans le noyau)

Symbole chimique → Fe

Nom → fer

Sources : IUPAC, Wikimedia Commons

Figure B.1 : tableau de Mendeleïev [31].

### B.2 Caractéristique des matériaux massifs :

Parameter	GaAs	GaN	GaBi
Lattice parameter (Å)	5.653	3.18	6.324
$E_g$ (eV)	1.42	43.36	1.45
$a_c$ (eV)	-7.17	-2.2	6.85
$a_v$ (eV)	-1.16	-5.2	0.79
Energy level $E_{\text{vav}}$ (eV)	-6.92	-6.5	-6.28
$\Delta_0$ (eV)	0.35	0.017	2.15
Shear deformation $b$ (eV)	-2	-2.2	-1.4
$C_{11}$ ( $e_{11}\text{dyn/cm}^2$ )	11.82	9.3	11.92
$C_{12}$ ( $e_{11}\text{dyn/cm}^2$ )	5.41	5.9	5.99
$m_e$ ( $m_0$ )	0.067	0.13	0.039
$\gamma_1$	7.65	3.07	13.4
$\gamma_2$	2.41	0.86	4.7
$N_c$ ( $10^{19}\text{cm}^{-3}$ ) à 300K	0.047	0.23	0.021
$N_v$ ( $10^{19}\text{cm}^{-3}$ ) à 300K	0.9	4.6	1.8
$\mu_n$ ( $\text{cm}^2\cdot\text{v}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ ) à 300K	8500	1000	3000
$\mu_p$ ( $\text{cm}^2\cdot\text{v}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ ) à 300K	400	350	1000

Tableau B.1 Paramètres physiques fondamentaux des principaux binaires III-V.

### B.3 indice de réfraction dans le matériau massif :

La variation des indices de réfraction des matériaux semi-conducteurs massifs sous le gap a été évaluée selon la formule de Sellmeier :



$$n^2(\lambda) = A + \frac{B}{1 - C/\lambda^2} + \frac{D}{1 - E/\lambda^2} \quad B.1$$

Les coefficients de Sellmeier A, B, C, D et E pour les principaux binaires sont données dans le tableau ci-dessous :

Matériau	A	B	C	D	E
GaAs	3.5	7.5	1666	1.93	1382
GaN	3.6	1.75	6.55	411	319

**Tableau B.2** Coefficients de Sellmeier pour les principaux binaires III-V.

Les indices de réfraction de ternaire est ensuite calculé à partir des indices des binaires selon la loi de Végard.

$$n^2(GaAsN) = (1 - x) * n^2(GaAs) + x * n^2(GaN) \quad B.2$$

#### B.4 Coefficient d'absorption :

matériau	Coefficient d'absorption
GaN	10 <sup>5</sup>
GaBi	10 <sup>5</sup>
GaAs	2.2*10 <sup>5</sup>

**Tableau B.3** Coefficients d'absorption pour les principaux binaires III-V.

Les coefficients d'absorption de ternaire est ensuite calculé à partir des coefficients des binaires selon la loi de Végard.

$$a(GaAsN) = (1 - x) * a(GaAs) + x * a(GaN) \quad B.3$$

## Bibliographie

---

- [1] M. Capderou « *Atlas Solaire de l'Algérie* », Modèles Théoriques et Expérimentaux, Vol.1, T1, Office des Publications Universitaires, EPAU, Algérie, 375 p., 1987.
- [2] A.Slami: «Etude et simulation d'une structure à base de GaNAsSb/GaAs pour le photovoltaïque», Mémoire d'ingénieur d'état, Université Saad Dahleb Blida, 2014.
- [3] A.Chovet et P.Masson: «physique des semi-conducteurs», Ecole Polytechnique Universitaire de Marseille, 2004/2005.
- [4] M. Benaïcha : « Etude des matériaux semi-conducteurs III-V Application à la conversion photovoltaïque », Magister en physique Université Algérie, 107p, 2007.
- [5] R. Castagné et all : « Circuits Intégrés en arséniure de Gallium. Physique, technologie et règles de conception », Masson et CINET ENST Paris, 1989.
- [6] S.Laval :«Physique des semi-conducteurs III-V», Ecole d'été d'optoélectronique, 2002.
- [7]<http://www.polytech-lille.fr/cours-transistor-effet-champ/hemt/Hemtc1b1.htm>.  
Consulte le 27/02/ 2016.
- [8] F. Levy : « Traité des matériaux (18) », Physique et technologie des semi-conducteurs, Presses Polytechniques et Universitaires Romandes, 1995.
- [9] H. Makhloufi : « Epitaxie de nouvelles hétérostructures pour la filière GaAs : puits/boites quantiques GaInAs sur surfaces structurées et alliages GaAsBi ». Micro et nanotechnologies/Microélectronique. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2013.
- [10] S.Kaci et al: «Etude et simulation d'une structure a base de GaInNAs/GaAs pour le photovoltaïque», Mémoire d'ingénieur d'état, Université Saad Dahleb Blida, 2011.

- [11] G. Ghosh: «Handbook of thermo-optic coefficients of optical materials with applications», Academic Press, 1998.
- [12] N.Sayah : «Etude et optimisation des paramètres physiques de la diode laser GaAsSbN/GaAs», mémoire de MAGISTERE, Université Djillali liabès de Sidi bel abas, 2011.
- [13] F.Kerker: «Calcul du gain optique d'un puits quantique à base de GaInNAs/GaAs pour son utilisation dans les télécommunications optiques émettant à une longueur d'onde de 1.3  $\mu\text{m}$ », Université Saad Dahleb de Blida, 2006.
- [14] K. Köksal et al: «Critical layer thickness of GaIn(N)As(Sb) QWs on GaAs and InP substrates for (001) and (111) orientations»,Eur. Phys. J. B69, pp. 211–218 ,2009.
- [15] L'effet photovoltaïque, <http://www.energiepluslesite.be/energieplus/page16679.htm>, consulté le 15/04/2012.
- [16] F.Kurker : « Microfabrication based design and simulation of hétérojonction solar cell », MSc Thesis. INAS, Çukurova University, ADANA, 2010.
- [17] Color wavelength table, [www.usbyte.com/common/approximate\\_wavelength.htm](http://www.usbyte.com/common/approximate_wavelength.htm), consulté le 15/04/2012.
- [18] R.Roshanak :«Réalisation des caractéristiques des cellules solaires organiques à couches composites polymères incluant des nanotubes de carbones », Thèse Doctorat, Université de Limogès, 2008.
- [19] B.Brousse : «Réalisation et caractérisation des cellules photovoltaïques organiques obtenus par dépôt physique », Thèse Doctorat, Université de Limogès, 2004.
- [20] F.Abdo : «Croissance de couche mince de silicium par épitaxie en phase liquide à basse température pour application photovoltaïques», Thèse de Doctorat à l'institut national de sciences appliquées de Lyon- France, 2007.

- [21] B.Garcia : « Indium gallium nitride multijunction solar cell simulation using Silvaco Atlas », Master's Thesis. Naval Post Graduate School, Monterey, California, 2007.
- [22] H. Mathieu : « Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques », 2ème édition, Masson ,1990.
- [23] R. Radbeh : « Réalisation et caractérisation de cellules solaires organiques à couches composites polymères incluant des nanotubes de carbone », Thèse de doctorat, Université de Limoges, Faculté des Sciences et Techniques, 2008.
- [24] M.A Green: « Solar cells fill factors », General graph and empirical expressions, 1981.
- [25] W. G. Bi et C. W. Tu: «Bowing parameter of the band-gap energy of  $GaN_xAs_{1-x}$  », Applied Physics Letters, vol. 70, pp. 1608-1610, 1997.
- [26] S. Fahy et al: «Alloy scattering of n –type carriers in  $GaN_xAs_{1-x}$  », Physical Review B, vol. 74, p. 035203, 2006.
- [27] T. Tiedje, E. C. Young and A. Mascarenhas: «Growth and properties of the dilute bismide semiconductor  $GaAs_{1-x}Bi_x$  a complementary alloy to the dilute nitrides, » International Journal of Nanotechnology, vol. 5, pp. 963-983, 2008.
- [28]<http://www.futura-sciences.com/magazines/matiere/infos/dico/d/physique-boite-quantique-4754/>, consulté le 07/06/2016.
- [29] M. Chakaroun : « Évaluation de nouveaux concepts d'encapsulation de cellules solaires organiques pour l'amélioration de leur durée de vie », thèse de doctorat, Université de Limoges, 2010.
- [30] B. AZEZA : « Hétéro-épitaxie par jets moléculaires de couches GaAs sur substrat Si pour photopiles solaires : adaptation par couche nanostructurée », Thèse de doctorat, Université de MONASTIR, Faculté des Sciences MONASTIR, 2008.

[31][http://www.liberation.fr/futurs/2016/01/07/mendeleiev-avance-de-quatre-cases\\_1424962](http://www.liberation.fr/futurs/2016/01/07/mendeleiev-avance-de-quatre-cases_1424962) , consulté le 07/06/2016.