



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE MINISTERE DE  
L'ENSEIGNEMENT SUPERIEURE ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

**UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID - TLEMCCEN**

# THÈSE

Présentée à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

**DOCTORAT EN SCIENCES**

Spécialité: Energies Renouvelables

Par :

**BOUDAUD Chahrazad**

Sur le thème

---

## Cellules solaires Tandem à base d'InGaN, pour haut rendement : Modélisation et Simulation Des performances

---

Soutenue publiquement le 13/ 03/ 2021 à Tlemcen devant le jury composé de :

Mme GHELLAI Nassera	Prof.	Université de Tlemcen	Présidente
Mr HAMDOUNE Abdelkader	Prof.	Université de Tlemcen	Directeur de thèse
Mr BAGHDADLI Tewfik	M.C.A	Université de Tlemcen	Examineur
Mr LASRI Boumédiène	Prof	Université de Saida	Examineur
Mr BOUKLI-HACENE Fouad	M.C.A	ESSA de Tlemcen	Examineur
Mr HABCHI Mohammed	M.C.A	ESSA de Tlemcen	Examineur

## Remerciements

Mes remerciements vont en premier lieu, à Allah le tout puissant qui m'a permis d'achever ce travail par sa miséricorde.

Je voudrais remercier tout particulièrement mon directeur de thèse Professeur HAMDOUNE Abdelkader, de m'avoir permis d'effectuer cette thèse. Je le remercie pour sa disponibilité tout au long de ce travail, pour ses conseils et son encouragement sans lequel ce travail n'aurait pas abouti. Je veux qu'il trouve ici l'expression de toute ma gratitude.

J'exprime ma profonde et respectueuse gratitude à Mme GHELLAI Nassera Professeur à l'université de Tlemcen, pour m'avoir fait l'honneur d'accepter de présider le jury de soutenance de ma thèse.

Je remercie ensuite l'ensemble des membres du jury, monsieur LASRI Boumédiène Professeur à l'université de Saida, monsieur BAGHDADLI Tewfik MCA à l'université de Tlemcen, monsieur BOUKLI-HACENE Fouad MCA à l'école supérieure des sciences appliquées de Tlemcen, et monsieur HABCHI Mohammed MCA à l'école supérieure des sciences appliquées de Tlemcen, pour avoir accepté d'examiner cette thèse.

Pour finir, je tiens à remercier toute ma famille et mes amis, qui m'ont fait confiance et m'ont soutenue pendant toute la durée de ma thèse.

# SOMMAIRE

<b>INTRODUCTION GÉNÉRALE .....</b>	<b>1</b>
<b>I. LA CELLULE PHOTOVOLTAÏQUE.....</b>	<b>4</b>
<b>I.1 INTRODUCTION.....</b>	<b>5</b>
<b>I.2 SPECTRE SOLAIRE.....</b>	<b>5</b>
<b>I.3 SEMI-CONDUCTEUR.....</b>	<b>7</b>
<b>I.4 JONCTION P-N .....</b>	<b>9</b>
<b>I.5 PRINCIPE DE LA CONVERSION PHOTOVOLTAÏQUE .....</b>	<b>10</b>
<b>I.6 PARAMÈTRES DE LA CELLULE PHOTOVOLTAÏQUE .....</b>	<b>11</b>
I.6.1 COURANT DE COURT-CIRCUIT ET TENSION DE CIRCUIT OUVERT .....	12
I.6.2 CIRCUIT ÉQUIVALENT.....	12
I.6.3 FACTEUR DE FORME .....	14
I.6.4 EFFICACITÉ .....	14
I.6.5 EFFICACITÉ QUANTIQUE ET RÉPONSE SPECTRALE.....	14
<b>I.7 CATÉGORIES DES CELLULES PHOTOVOLTAÏQUES.....</b>	<b>15</b>
I.7.1 CELLULES SOLAIRES AU SILICIUM .....	17
I.7.2 CELLULES SOLAIRES AU SILICIUM AMORPHE ET AU SILICIUM MICROCRISTALLIN. ....	18
I.7.3 CELLULES SOLAIRES AU CdTe .....	19
I.7.4 CELLULES SOLAIRES AU CIGS .....	20
I.7.5 CELLULES SOLAIRES III-V MULTI-JONCTIONS .....	20
I.7.6 CELLULES SOLAIRES DE KESTERITE.....	22
I.7.7 CELLULES SOLAIRES ORGANIQUES .....	22
I.7.8 CELLULES SOLAIRES À COLORANT (DSSC) .....	22
I.7.9 CELLULES SOLAIRES À BASE DE PÉROVSKITE .....	23
<b>I.8 CONCLUSION.....</b>	<b>23</b>
<b>II. LE MATÉRIAU INGAN POUR LES APPLICATIONS PHOTOVOLTAÏQUES.....</b>	<b>25</b>
<b>II.1 INTRODUCTION.....</b>	<b>26</b>
<b>II.2 PROPRIÉTÉS STRUCTURELLES .....</b>	<b>26</b>
II.2.1 STRUCTURE CRISTALLINE.....	26
II.2.2 PROPRIÉTÉS MÉCANIQUES .....	27
II.2.3 POLARISATION .....	29
II.2.3.1 Polarisation spontanée .....	29
II.2.3.2 Polarisation piézoélectrique .....	30
II.2.3.3 Polarisation totale .....	31
<b>II.3 PROPRIÉTÉS ÉLECTRIQUES .....</b>	<b>32</b>
II.3.1 STRUCTURE DE BANDE DES NITRURES-III DE TYPE WURTZITE .....	32
II.3.2 BANDE INTERDITE D'INGAN.....	32
II.3.3 CONCENTRATION D'ÉLECTRONS DANS LES NITRURES .....	34
II.3.4 RECOMBINAISON .....	34
<b>II.4 PROPRIÉTÉS OPTIQUES .....</b>	<b>36</b>
II.4.1 INDICE DE RÉFRACTION .....	36

II.4.2	FONCTION DIÉLECTRIQUE.....	37
II.4.3	GAP D'ABSORPTION.....	37
<b>II.5</b>	<b>PROPRIÉTÉS THERMIQUES.....</b>	<b>38</b>
<b>II.6</b>	<b>HÉTÉROÉPITAXIE DES NITRURES D'ÉLÉMENTS III.....</b>	<b>39</b>
II.6.1	SUBSTRATS DE CROISSANCE.....	39
II.6.2	MÉTHODES DE CROISSANCE.....	40
II.6.3	EPAISSEUR CRITIQUE.....	41
II.6.4	DÉSACCORD DE MAILLE.....	43
II.6.5	DÉFAUTS STRUCTURAUX.....	44
	<i>II.6.5.1 Dislocations.....</i>	<i>45</i>
<b>II.7</b>	<b>DOPAGE DANS LES NITRURES D'ÉLÉMENTS III.....</b>	<b>47</b>
<b>II.8</b>	<b>THÉORIES SUR LES CELLULES SOLAIRES À BASE D'INGAN.....</b>	<b>47</b>
II.8.1	CELLULES SOLAIRES HOMO-JONCTION À BASE D'INGAN.....	48
II.8.2	CELLULES SOLAIRES HÉTÉROJONCTION À BASE D'INGAN.....	51
II.8.3	INTÉRÊT DU MATÉRIAU INGAN POUR LES CELLULES SOLAIRES TANDEM.....	54
<b>II.9</b>	<b>CONCLUSION.....</b>	<b>55</b>
<b>III.</b>	<b>MODÉLISATION ET OPTIMISATION D'UNE CELLULE SOLAIRE TANDEM À BASE D'INGAN.....</b>	<b>57</b>
<b>III.1</b>	<b>INTRODUCTION.....</b>	<b>58</b>
<b>III.2</b>	<b>MODÉLISATION ET SIMULATION NUMÉRIQUE.....</b>	<b>58</b>
III.2.1	MODÈLE DÉRIVE-DIFFUSION.....	58
	<i>III.2.1.1 Equation de poisson.....</i>	<i>58</i>
	<i>III.2.1.2 Equations de continuité.....</i>	<i>59</i>
	<i>III.2.1.3 Equations de transport.....</i>	<i>59</i>
III.2.2	MODÉLISATIONS PHYSIQUES.....	59
	<i>III.2.2.1 Modèles de mobilité.....</i>	<i>60</i>
	<i>III.2.2.2 Coefficient d'absorption.....</i>	<i>60</i>
	<i>III.2.2.3 Modèles de génération et recombinaison des porteurs.....</i>	<i>61</i>
III.2.3	LOGICIEL DE SIMULATION SILVACO.....	61
	<i>III.2.3.1 Outils de SILVACO.....</i>	<i>61</i>
	<i>III.2.3.2 Mode de fonctionnement.....</i>	<i>62</i>
<b>III.3</b>	<b>RÉSULTATS DE SIMULATION.....</b>	<b>63</b>
III.3.1	VARIATION DE LA CONCENTRATION D'INDIUM DANS LA SOUS CELLULE.....	65
III.3.2	STRUCTURE ET CARACTÉRISTIQUES DE LA CELLULE SOLAIRE TANDEM.....	66
III.3.3	VARIATION DE L'ÉPAISSEUR ET DU DOPAGE DES COUCHES INTRINSÈQUES.....	69
III.3.4	VARIATION DE L'ÉPAISSEUR ET DU DOPAGE DE LA COUCHE P-GAN.....	70
III.3.5	VARIATION DU DOPAGE P DES COUCHES INGAN.....	71
III.3.6	EFFET DE LA TEMPÉRATURE.....	72
III.3.7	TEXTURATION ET PARAMÈTRES OPTIMALES.....	77
<b>III.4</b>	<b>CONCLUSION.....</b>	<b>80</b>
	<b>CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES.....</b>	<b>81</b>
	<b>REFERENCES.....</b>	<b>84</b>
	<b>PUBLICATIONS ET COMMUNICATIONS.....</b>	<b>98</b>

## Liste des figures

Figure I.1 –	Spectre de rayonnement solaire.....	5
Figure I.2 –	(a) Rayonnement solaire total et diffus, (b) La diffusion solaire dans l'atmosphère.....	6
Figure I.3 –	(a) Angle de zénith et "Air Mass" (AM), (b) Le spectre solaire AM0, AM1.5G (Global) et AM1.5D (Direct).....	7
Figure I.4 –	Exemple pour deux semi-conducteurs différents. (a) de gap direct (cas du GaAs), et (b) du Gap indirect (cas du silicium).....	9
Figure I.5 –	bande d'énergie et les porteurs majoritaires pour les semi-conducteurs de type n et les semi-conducteurs de type p.....	9
Figure I.6 –	Diagramme d'énergie de la jonction à l'équilibre thermodynamique.....	10
Figure I.7 –	Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque.....	12
Figure I.8 –	Circuit équivalent d'une cellule solaire.....	13
Figure I.9 –	Caractéristique J-V.....	14
Figure I.10 –	(a) EQE idéal et pratique d'une cellule photovoltaïque. (b) Réponse spectrale idéale d'une cellule PV à toutes les longueurs d'onde jusqu'à la longueur d'onde de la bande interdite ( $\lambda_g$ ).....	16
Figure I.11 –	Courbe d'efficacité S-Q pour une cellule solaire à simple jonction sous un éclairage AM1.5 à partir de la page Wiki. Les points représentent les meilleures cellules expérimentales à simple jonction fabriquées à ce jour.....	17
Figure I.12 –	Catégories des cellules photovoltaïques.....	18
Figure I.13 –	(a) cellule solaire PERL, (b) cellule solaire avec la structure HIT de Panasonic Co. (Japon).....	19
Figure I.14 –	Structures Typique des cellules solaires à base de CdTe (a) et de CIGS (b).....	20
Figure I.15 –	(a) Structure d'une cellule solaire à trois jonctions. b) les différentes parties du spectre solaire absorbées dans cette cellule.....	22
Figure I.16 –	Répartition du spectre AM0 par la cellule solaire 5J et la structure des différentes couches de la cellule.....	22
Figure I.17 –	Comparaison des progrès de l'efficacité des cellules solaires en pérovskite avec les autres technologies PV à couche mince.....	24
Figure II.1 –	Structure atomique wurtzite.....	27
Figure II.2 –	(a) Plans polaires et non polaires et directions cristallographiques dans un cristal de GaN (b) Exemples de plans de cristaux de GaN semi-polaires à faible indice.....	28
Figure II.3 –	Polarisation spontanée selon les deux directions (0001) et(000 $\bar{1}$ ).....	30
Figure II.4 –	Diagramme de bande théorique (a) de GaN (b) d'InN.....	33
Figure II.5 –	Schéma de diagramme de bande d'énergie représentant la recombinaison SRH à un défaut de niveau (+1/0) dans un matériau ayant une bande gap $E_g$ .....	36
Figure II.6 –	Schéma des processus de recombinaison des porteurs dans les semi-conducteurs. (a) La recombinaison radiative se produit verticalement dans le diagramme de structure des bandes. (b) Recombinaison Auger, un mécanisme de recombinaison non radiative à trois particules (c) Dans les semi-conducteurs à large bande interdite tels que les nitrures du groupe III, les processus Auger dominants sont indirects.....	36
Figure II.7 –	Variation de l'indice de réfraction dans l'InGaN, l'AlGaIn et l'InAlN....	38
Figure II.8 –	Courbe de transmission (noire) et de réflexion (rouge) du GaN.....	39

Figure II.9 –	l'épaisseur critique d'InGaN en fonction de la concentration d'indium. Les diamants verts sont des mesures de [47], les cercles creux sont obtenus de [48], les triangles bleus sont de [49] et les hexagones rouges sont obtenus de [50]. La ligne continue correspond au tracé théorique....	43
Figure II.10 –	Les deux épaisseurs critiques de la génération de dislocations et de la croissance en 3D en fonction de la composition d'indium.....	44
Figure II.11 –	Contrainte liée au désaccord de maille : Cas (a), ( $a_F < a_S$ ), la maille est en tension. Cas (b), ( $a_F > a_S$ ), la maille est en compression.....	45
Figure II.12 –	Variation du désaccord de maille d'InGaN élaboré sur pseudo-substrat de GaN.....	45
Figure II.13 –	Image TEM représentant les trois type de dislocation a) type vis, b) type coin, c) type mixte.....	46
Figure II.14 –	Images MEB montrant la morphologie de surface d'échantillons ayant (a) une faible densité de dislocation et (b) une forte densité de dislocation.....	47
Figure II.15 –	(a) la mesure de l'EQE et (b) les courbes J-V mesurées sous une condition d'éclairage de 1,5 AM des structures du dispositif.....	47
Figure II.16 –	structure de la cellule solaire proposée par Jani et al.....	49
Figure II.17 –	Caractéristiques I-V de la cellule solaire P-i-N à base d'InGaN en fonction compositions d'indium étudiée par Cai et al.....	50
Figure II.18 –	Caractéristiques J-V d'une jonction n <sup>+</sup> -p d'In <sub>0.25</sub> Ga <sub>0.75</sub> N sous un spectre AM1.5G. la structure de la cellule est montrée sur le schéma.....	51
Figure II.19 –	Structure de la cellule solaire élaborée par Islam et al.....	51
Figure II.20 –	Caractéristiques J-V de la structure comprenant une couche active a) In <sub>0.25</sub> Ga <sub>0.75</sub> N et b) In <sub>0.16</sub> Ga <sub>0.84</sub> N.....	53
Figure II.21 –	Schéma de la cellule solaire p-i-n en double hétérojonction proposée par Jani et al.....	53
Figure II.22 –	Caractéristique courant-tension obtenue par Jani et al. donnant un V <sub>CO</sub> de 2,4 V, un J <sub>CC</sub> de 3,7 mA/cm <sup>2</sup> et un FF de 78%.....	53
Figure II.23 –	Caractéristiques I-V d'une cellule solaire p-GaN/iInGaN/n-GaN sous éclairage et dans l'obscurité, ainsi que la caractéristique P -V calculée sous éclairage. Le graphe encadré montre la courbe I -V dans l'obscurité des mêmes cellules photovoltaïques en utilisant une échelle logarithmique.....	54
Figure II.24 –	Schéma de la cellule solaire pin en double hétérojonction proposée par Neufeld et al.....	54
Figure II.25 –	Caractéristique courant-tension d'une cellule solaire pin à base d'InGaN/GaN obtenue par Neufeld et al.....	55
Figure II.26 –	Rendement et propriétés électriques de structure InGaN en fonction du nombre de sous cellules.....	55
Figure II.27 –	Diagramme de bande d'une structure 10 jonctions à base d'InGaN.....	56
Figure II.28 –	Schéma de la cellule solaire à double-jonction simulée par Zhang et al...	56
Figure II.29 –	Cellule solaire tandem InGaN/Si étudiée par M. Lourassi, B. Soudini....	56
Figure III.1 –	Les différents outils de SILVACO.....	63
Figure III.2 –	Fichiers d'entrée et de sortie d'Atlas.....	64
Figure III.3 –	Structure de la sous-cellule.....	64
Figure III.4 –	Maillage de la sous-cellule.....	65
Figure III.5 –	Diagramme des bandes de la sous-cellule.....	65
Figure III.6 –	Concentration des électrons et des trous à travers la structure de la sous-cellule.....	66

Figure III.7 –	La caractéristique J-V de la sous cellule pour différentes composition d'indium.....	67
Figure III.8 –	Structure de la cellule tandem.....	68
Figure III.9 –	Densité de courant de court circuit, tension de circuit ouvert et rendement de conversion des différentes cellules solaires simulées.....	69
Figure III.10 –	La caractéristique J-V de la cellule tandem, la sous cellule supérieure et la sous cellule inférieure.....	70
Figure III.11 –	Variation du rendement de la cellule (droite) et de la densité de courant en fonction de l'épaisseur des couches intrinsèques pour différentes dopages.....	71
Figure III.12 –	Variation des paramètres de la cellule en fonction de l'épaisseur (droite) et du dopage de la couche p-GaN.....	72
Figure III.13 –	Variation des paramètres de la cellule en fonction de dopage de la couche p-InGaN.....	73
Figure III.14 –	Variation de l'énergie de la bande interdite de la cellule tandem en fonction de la température.....	74
Figure III.15 –	Champ électrique à travers la structure pour différentes valeurs de température.....	75
Figure III.16 –	Variation du taux de recombinaison radiative à travers la structure pour différentes valeurs de température.....	75
Figure III.17 –	Variation du taux de recombinaison SRH à travers la structure pour différentes valeurs de température.....	76
Figure III.18 –	Caractéristique J-V pour différentes valeurs de température.....	77
Figure III.19 –	Caractéristique P-V pour différentes valeurs de température.....	77
Figure III.20 –	Variations des paramètres de la cellule tandem en fonction de la température.....	78
Figure III.21 –	Caractéristique J-V de la cellule tandem avec et sans couche antireflet...	79
Figure III.22 –	Caractéristique P-V de la cellule tandem avec et sans couche antireflet...	79
Figure III.23 –	Efficacité quantique externe de la cellule modélisée avec CAR et sans CAR.....	80
Figure III.24 –	Réponse spectrale de la cellule tandem sans et avec CAR.....	81

## Liste des tableaux

Tableau II.1 – Paramètres de réseau de la structure wurtzite pour GaN et InN.....	28
Tableau II.2 – Paramètres nécessaires pour le calcul des polarisations.....	32
Tableau II.3 – Valeur du paramètre de courbure reporté par différents groupes en fonction de l'épaisseur de la couche, la composition en indium ou l'état de contrainte de la couche.....	34
Tableau II.4 – Résumé des propriétés thermiques du GaN et de l'InN.....	40
Tableau II.5 – Caractéristiques physiques des substrats usuels utilisés pour la croissance du GaN.....	41
Tableau II.6 – Etat de l'art de cellules solaires homo-jonctions à base d'InGaN.....	52
Tableau II.7 – Etat de l'art de cellules solaires hétérojonctions à base d'InGaN.....	54
Tableau III.1 – les paramètres utilisés dans l'équation (III.7) pour modéliser les mobilités des électrons et des trous.....	61
Tableau III.2 – Résultats de simulation.....	67
Tableau III.3 – Cellules tandem simulées.....	68
Tableau III.4 – Résultats de simulation.....	69
Tableau III.5 – Paramètres optimisée de la cellule tandem modélisée.....	73
Tableau III.6 – $E_g$ , $\alpha$ , $\beta$ pour GaN et InN.....	74
Tableau III.7 – Gaps de GaN, InN, et $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ à différentes températures.....	74

## INTRODUCTION GÉNÉRALE

Nous sommes confrontés à des défis extrêmement importants liés au changement climatique. Il est clair que l'activité humaine affecte sérieusement l'atmosphère, entraînant une augmentation de la température à la surface de la terre, affectant, entre autres, la stabilité thermique de notre planète. Cela est dû aux développements technologiques très rapides au cours des cent dernières années, qui ont reposé sur l'utilisation intensive des combustibles fossiles [1]. Face aux défis pressants du changement climatique et de l'épuisement des combustibles fossiles, les sources d'énergie renouvelables telles que le solaire photovoltaïque (PV) sont considérées comme une alternative propre et durable [2]. L'effet photovoltaïque a été démontré par Edmond Becquerel en 1839. Les principes physiques ont été expliqués dans un article d'Albert Einstein en 1905, pour lequel il a reçu le prix Nobel de physique en 1921. Les chercheurs des Laboratoires Bell ont produit la première cellule photovoltaïque pratique en 1954, avec un rendement rapporté de 6%. Shockley et Queisser ont montré qu'une seule cellule solaire à jonction p-n devrait avoir un rendement maximal de 30%, pour un écart énergétique de 1.1 eV [1]. Une telle valeur idéale de bande interdite correspond étroitement à celle du silicium. De nombreux efforts ont été déployés pour atteindre l'efficacité maximale prévue, en tenant compte plusieurs facteurs tels que, la diminution des coûts de production, la diminution de l'impact environnemental, etc.

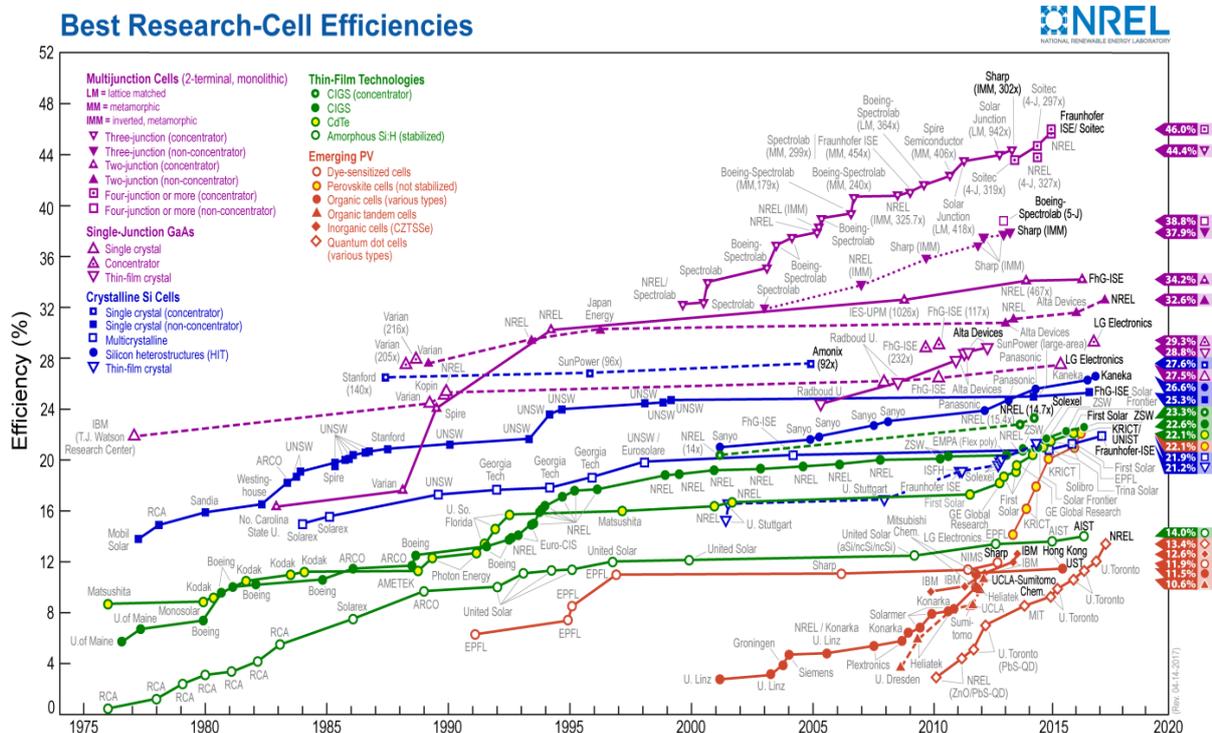


Figure 1 – L'état de l'art de l'efficacité rapporté depuis 1975 [3].

Aujourd'hui, la technologie de silicium cristallin est largement utilisée dans la production PV, avec près de 95% de la production mondiale [4]. Cependant, la fabrication des cellules solaires à base de silicium reste coûteuse et nécessite une importante quantité de matériau. En outre, les cellules solaires à simple jonction de silicium approchent de leurs limites supérieures en termes d'efficacité théorique maximale (26.7%) [5], [6]. Or, la nécessité d'augmenter la production d'énergie prend à la recherche sur l'utilisation d'autres matériaux alternatifs en parallèle avec la recherche dans la filière silicium. De nombreuses recherches s'intéressent aux technologies à couches minces, sur lesquelles on trouve les matériaux III-V [4]. Des résultats d'efficacité remarquables ont été obtenus, des efficacités de 23.35%, 21%, et 29.1% sont démontrés pour des cellules solaires à couche minces à base de CIGS, CdTe et GaAs, respectivement. Les cellules solaires multi-jonctions III-V ont obtenu environ 40% d'efficacité [5]. La figure 1 montre l'évolution des efficacités de différentes technologies photovoltaïques depuis 1975 [3].

Dans ce travail, nous nous intéressons au matériau ternaire InGaN. Au cours des dernières années, le nitrure de gallium-indium devient un matériau prometteur pour les applications optoélectroniques, en particulier le photovoltaïques. InGaN se caractérise par sa bande interdite directe allant de l'infrarouge à l'ultraviolet (0.65 eV pour InN, 3.4 eV pour GaN). Le gap des alliages InGaN inclut presque tous le spectre solaire (figure 2), la propriété qui lui confère une grande importance dans la fabrication des cellules solaires multi-jonctions à haut rendement [1], [7].

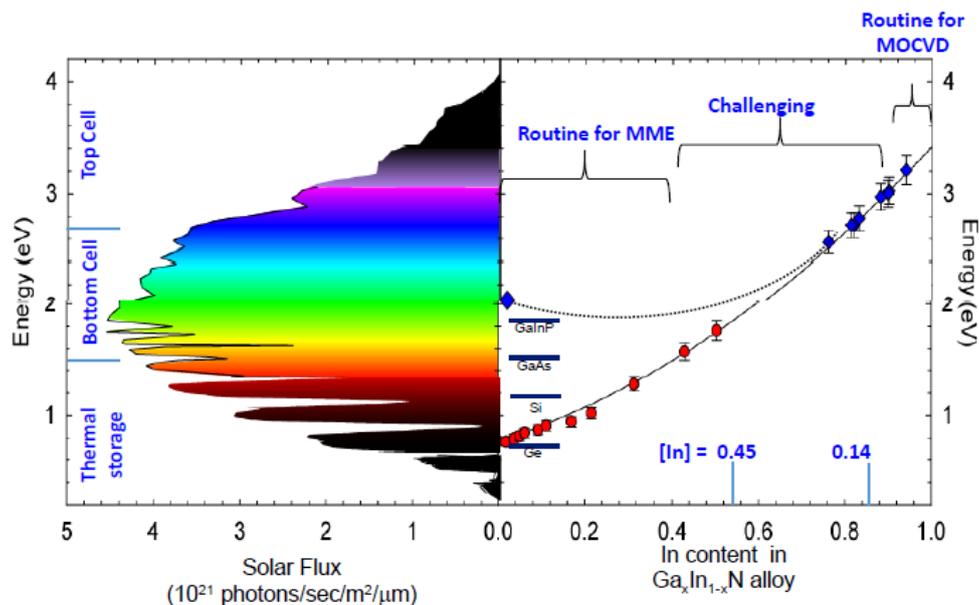


Figure 2 – Spectre solaire et énergie de la bande interdite de l'alliage  $Ga_xIn_{1-x}N$  [1].

En fait, plusieurs couches d'InGaN de gaps différents peuvent être élaborées en faisant varier la composition en indium. Par conséquent, il est possible d'élaborer des cellules solaires multi-jonctions. En outre, le matériau InGaN possède les propriétés désirées, telles qu'une résistance élevée aux radiations et un grand coefficient d'absorption ( $10^5 \text{ cm}^{-1}$ ) [8]. Théoriquement, ces propriétés d'InGaN devraient permettre d'obtenir des cellules solaires de haute efficacité, de longue durée de vie et ultra-minces. Toutefois, plusieurs facteurs entravent le développement de la filière InGaN, comme l'absence de substrat approprié pour la croissance épitaxiale, un dopage difficile de type P et une incorporation d'indium relativement faible [9].

L'objectif de ce travail est de modéliser et optimiser les performances d'une cellule solaire de type tandem à base d'InGaN, cela en jouant sur les paramètres physiques et géométriques de la cellule. Le travail est effectué en utilisant le logiciel Atlas de SILVACO pour la simulation.

Ce manuscrit est divisé en trois chapitres, comme suit :

Le premier chapitre aborde l'importance de l'énergie solaire, les notions de base des semi-conducteurs, le principe de fonctionnement physique d'une cellule solaire, ses paramètres importants et les différentes filières photovoltaïques existantes.

Le deuxième chapitre est consacré à l'étude des propriétés et caractéristiques des matériaux III-V ainsi que l'état de l'art des cellules solaires à base d'InGaN.

Le troisième et dernier chapitre est consacré aux simulations menées à l'aide d'Atlas de SILVACO. D'abord nous expliquons les équations de base et les modèles physiques utilisés dans les simulations. Après, nous présentons les résultats d'optimisation de la structure tandem étudiée dans ce travail, à savoir, les caractéristiques J-V et P-V, le champ électrique et la recombinaison à travers la structure, la réponse spectrale et l'efficacité quantique externe.

Enfin, le manuscrit se termine par une conclusion générale qui résume le travail réalisé dans ce travail, et des perspectives.

# I. La cellule photovoltaïque

---

<b>I.1</b>	<b>INTRODUCTION</b> .....	<b>5</b>
<b>I.2</b>	<b>SPECTRE SOLAIRE</b> .....	<b>5</b>
<b>I.3</b>	<b>SEMI-CONDUCTEUR</b> .....	<b>7</b>
<b>I.4</b>	<b>JONCTION P-N</b> .....	<b>9</b>
<b>I.5</b>	<b>PRINCIPE DE LA CONVERSION PHOTOVOLTAÏQUE</b> .....	<b>10</b>
<b>I.6</b>	<b>PARAMÈTRES DE LA CELLULE PHOTOVOLTAÏQUE</b> .....	<b>11</b>
I.6.1	COURANT DE COURT-CIRCUIT ET TENSION DE CIRCUIT OUVERT .....	12
I.6.2	CIRCUIT ÉQUIVALENT.....	12
I.6.3	FACTEUR DE FORME .....	14
I.6.4	EFFICACITÉ .....	14
I.6.5	EFFICACITÉ QUANTIQUE ET RÉPONSE SPECTRALE.....	14
<b>I.7</b>	<b>CATÉGORIES DES CELLULES PHOTOVOLTAÏQUES</b> .....	<b>15</b>
I.7.1	CELLULES SOLAIRES AU SILICIUM .....	17
I.7.2	CELLULES SOLAIRES AU SILICIUM AMORPHE ET AU SILICIUM MICROCRISTALLIN. ....	18
I.7.3	CELLULES SOLAIRES AU CdTe .....	19
I.7.4	CELLULES SOLAIRES AU CIGS .....	20
I.7.5	CELLULES SOLAIRES III-V MULTI-JONCTIONS .....	20
I.7.6	CELLULES SOLAIRES DE KESTERITE.....	22
I.7.7	CELLULES SOLAIRES ORGANIQUES .....	22
I.7.8	CELLULES SOLAIRES À COLORANT (DSSC) .....	22
I.7.9	CELLULES SOLAIRES À BASE DE PÉROVSKITE .....	23
<b>I.8</b>	<b>CONCLUSION</b> .....	<b>23</b>

---

## I.1 Introduction

Dans ce premier chapitre, nous abordons l'importance de l'énergie solaire, nous allons décrire le spectre solaire arrivant sur la Terre ; ensuite des notions sur les semi-conducteurs sont présentées. Nous allons présenter le fonctionnement d'une cellule photovoltaïque avec les équations physiques permettant de définir ses paramètres, et nous allons présenter les différentes technologies photovoltaïques actuelles.

## I.2 Spectre solaire

Le soleil est le centre de gravité du système solaire. La fusion thermonucléaire entre les atomes d'hydrogène et les atomes d'hélium se déroule sans cesse au cœur du soleil à des millions de degrés de température. La perte de la matière pendant la fusion libère une énorme quantité d'énergie sous forme de rayonnement électromagnétique. L'énergie atteint la croûte de l'atmosphère terrestre avec une irradiance moyenne de  $1367 \text{ W/m}^2$  appelée constante solaire, qui varie en fonction de la distance Terre-soleil. Le rayonnement solaire de la surface du Soleil est transmis à la terre, à la vitesse de la lumière. La figure I.1 montre le spectre solaire, c'est la répartition du rayonnement solaire en fonction de la longueur d'onde. La production de rayonnement total du soleil est approximativement équivalente à celle d'un corps noir à  $5776 \text{ K}$ . Ce rayonnement solaire correspond parfaitement à l'émission du corps noir dans la région visible et infrarouge à cette température, mais s'écarte de la région UV [10].

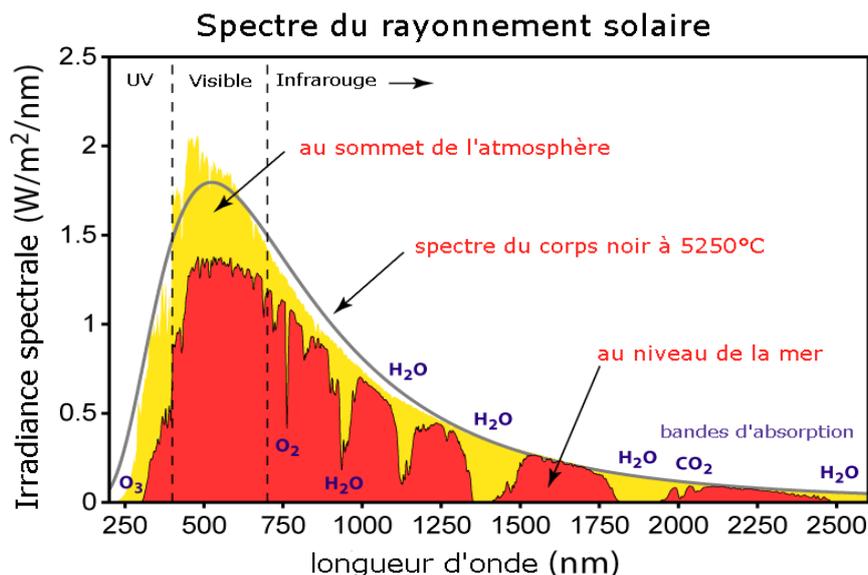


Figure I.1 – Spectre de rayonnement solaire [11].

Le rayonnement solaire qui atteint la surface de la terre est composé de rayonnement solaire direct, de rayonnement solaire diffus et de rayonnement réfléchi qui peut être négligé. La figure I.2 (a) représente le pourcentage du rayonnement diffus dans le rayonnement total ( $I_T$ ) [12]. L'atmosphère terrestre a une influence considérable sur l'intensité du rayonnement solaire atteignant le sol. Sa hauteur est de 70 à 80 km, et elle se compose principalement d'azote (78%) et d'oxygène (21%). Les autres gaz et la vapeur d'eau ne représentent que 1%, mais peuvent avoir un effet important sur le climat et l'environnement en tant que «gaz à effet de serre» comme le méthane et le dioxyde de carbone. Les niveaux d'absorption et de diffusion changent à mesure que les constituants de l'atmosphère changent. Les nuages bloquent la plupart des rayonnements directs. Les variations saisonnières et les tendances de l'épaisseur de la couche d'ozone ont un effet important sur le niveau UV terrestre [10]. Une grande partie des photons infrarouges sont absorbés par le dioxyde de carbone ( $CO_2$ ). La vapeur d'eau dans l'air absorbe 30% de l'énergie incidente. Le spectre au sol dépend également de la profondeur de déplacement dans l'atmosphère. En outre, la majeure partie de l'énergie incidente se produit à l'extrémité bleue du spectre, ce qui explique la couleur du ciel [12]. La figure I.2 (b) représente La diffusion solaire dans l'atmosphère, avant d'atteindre la surface de la terre [13].

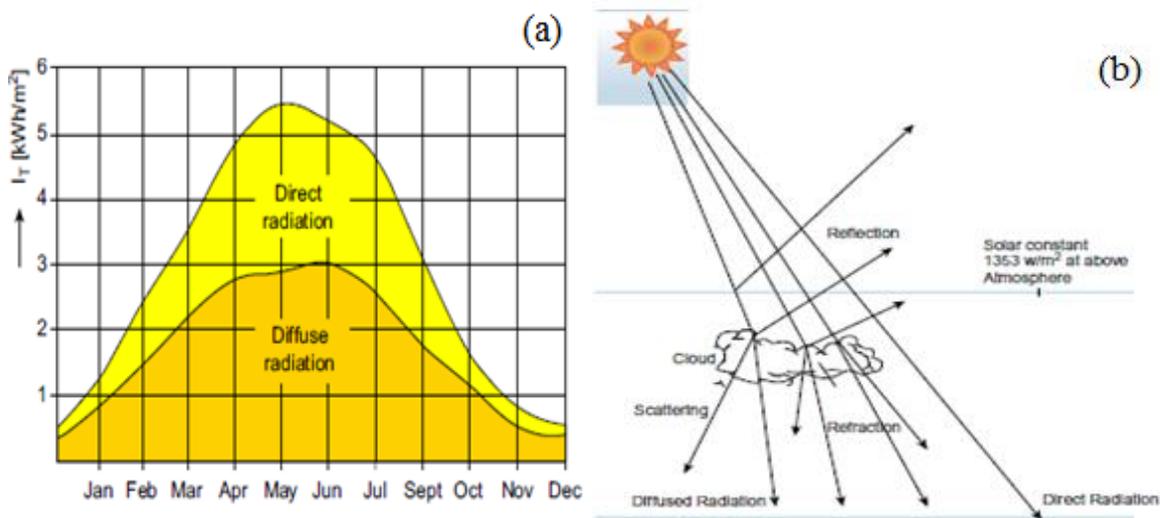


Figure I.2 – (a) Rayonnement solaire total et diffus [12], [14], (b) La diffusion solaire dans l'atmosphère [13].

La distance relative que la lumière doit parcourir dans l'atmosphère à un endroit donné est appelée masse d'air (AM). En dehors de l'atmosphère terrestre la masse d'air est nulle (AM0). Lorsque le soleil est directement au zénith, la masse d'air est égale à 1.0 (AM 1.0). Cette valeur change en fonction de l'angle du soleil depuis le zénith ; si ce dernier augmente, la

masse d'air augmente de telle sorte qu'à environ  $48^\circ$  de la verticale, la masse d'air est de 1.5 (AM1.5) et à  $60^\circ$  de la verticale, la masse d'air est 2.0 (la figure I.3(a)). Le spectre AM1.5 est le spectre solaire standard pour les tests des cellules solaires. On trouve deux types de spectre AM1.5; "Global" et "Direct normal" (figure I.3(b)). "Global" ou bien total est la somme du rayonnement solaire direct du disque solaire plus le rayonnement diffus. "Direct" désigne seulement le rayonnement solaire du disque du soleil, plus le rayonnement dispersé autour du disque; "normal" signifie que les rayons du soleil sont perpendiculaires (normaux) au dispositif de réception [13], [15].

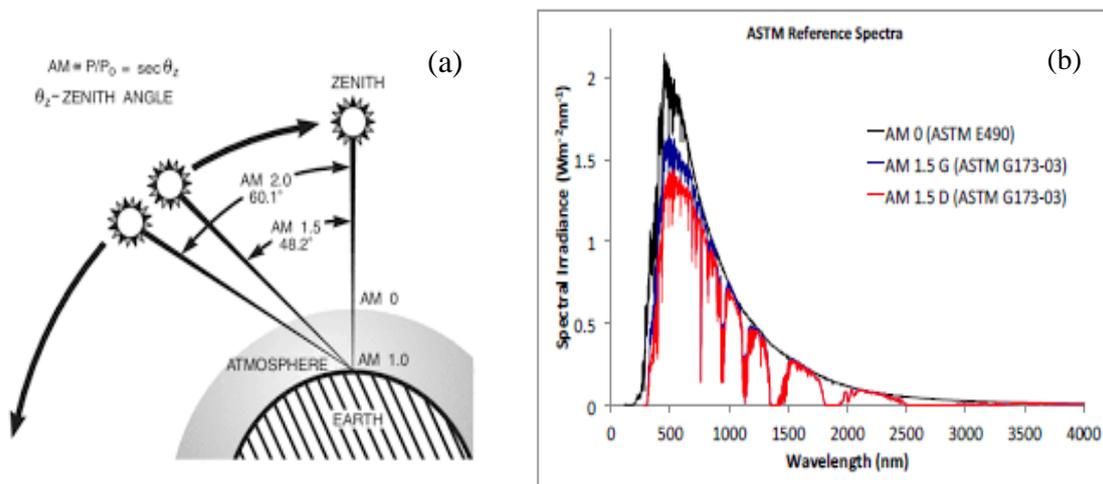


Figure I.3 – (a) Angle de zénith et "Air Mass" (AM) [16], (b) Le spectre solaire AM0, AM1.5G (Global) et AM1.5D (Direct) [17].

### I.3 Semi-conducteur

Les semi-conducteurs sont des matériaux dont la conductivité est intermédiaire entre celles des isolants et des conducteurs. Le véritable pouvoir des semi-conducteurs est obtenu en ajoutant de petites quantités contrôlées d'atomes dopants, ou d'impuretés. L'ajout de quantités contrôlées d'atomes dopants, donneurs ou accepteurs, crée un matériau appelé semi-conducteur extrinsèque. Les donneurs sont des atomes qui ont une valence plus élevée que les atomes constituant le matériau pur, alors que les accepteurs ont une valence plus faible. On aura ainsi, soit des électrons majoritaires, et le semi-conducteur est dit de type n soit des trous majoritaires, et le semi-conducteur est dit de type p [18], [19].

Dans un semi-conducteur parfait, pour  $T \neq 0$ , chaque fois qu'un électron part de la bande de valence, et passe dans la bande de conduction, un trou apparaît dans la bande de valence. La quantité d'électrons est ainsi rigoureusement égale à la quantité de trous ; leur concentration commune est appelée concentration intrinsèque  $n_i$ . Le matériau est dit dans ce cas intrinsèque [20] :

$$p = n = n_i \quad (I.1)$$

et donc

$$p \times n = n_i^2 \quad (I.2)$$

Le niveau de Fermi d'un semi-conducteur intrinsèque est calculé par :

$$E_F = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{N_v}{N_c} \quad (I.3)$$

Comme le deuxième terme est beaucoup plus petit que le premier terme du second membre, le niveau de Fermi d'un semi-conducteur intrinsèque est proche du milieu de la bande interdite [21].

Lors de l'interaction du semi-conducteur avec un rayonnement électromagnétique, la forme du diagramme de phases a un rôle très important. Dans un diagramme de bande, le maximum des courbes de la bande de valence se situe au-dessous du minimum des courbes de la bande de conduction. La distance énergétique entre ces extremums s'appelle la largeur de la bande interdite ou de façon plus condensée le gap. Selon la forme du diagramme de bande, on distingue deux catégories de semi-conducteurs ; lorsque les extremums correspondent à la même valeur de  $k$  (figure I.4(a)), c'est-à-dire à la même quantité de mouvement, nous dirons que le gap est direct. Un électron effectuant la transition de la bande de conduction vers la bande de valence, émettra un photon d'une énergie correspondant à  $\Delta E$ . Notons que la longueur d'onde associée sera proportionnelle à cette énergie. Mais suivant les cristaux ; les extremums peuvent être décalés, ils correspondent à des vecteurs d'onde  $\vec{k}$  différents (figure I.4(b)), ces semi-conducteurs sont dits à gap indirect [20].

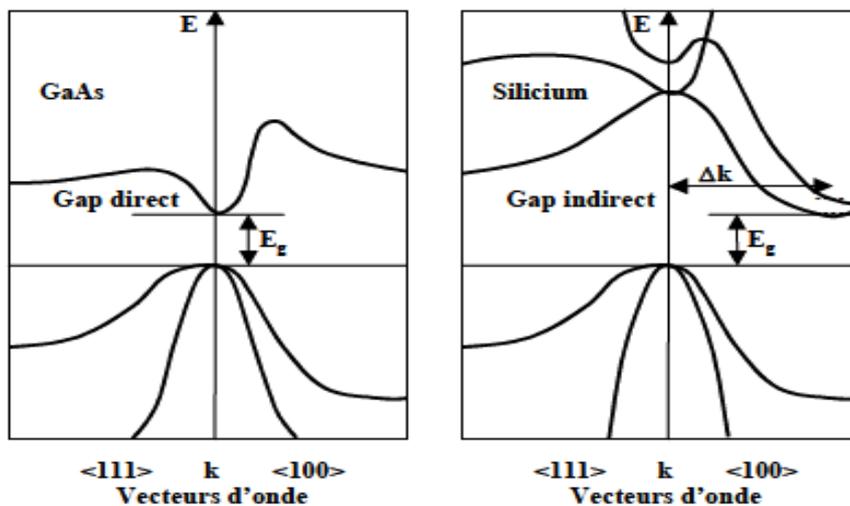


Figure I.4 – Exemple pour deux semi-conducteurs différents : (a) gap direct (cas du GaAs), et (b) gap indirect (cas du silicium) [20].

#### I.4 Jonction p-n

La jonction p-n est couramment utilisée pour les cellules solaires. Le rôle important de la jonction p-n est la séparation de charge des électrons et des trous photogénérés par la lumière. La figure I.5 montre l'image de bande d'énergie et les porteurs majoritaires pour les semi-conducteurs de type n et les semi-conducteurs de type p. Lorsqu'on met en contact deux matériaux de type n et de type p, une jonction p-n est formée. Les électrons majoritaires dans le matériau de type n diffusent vers le matériau de type p et réciproquement pour les trous.

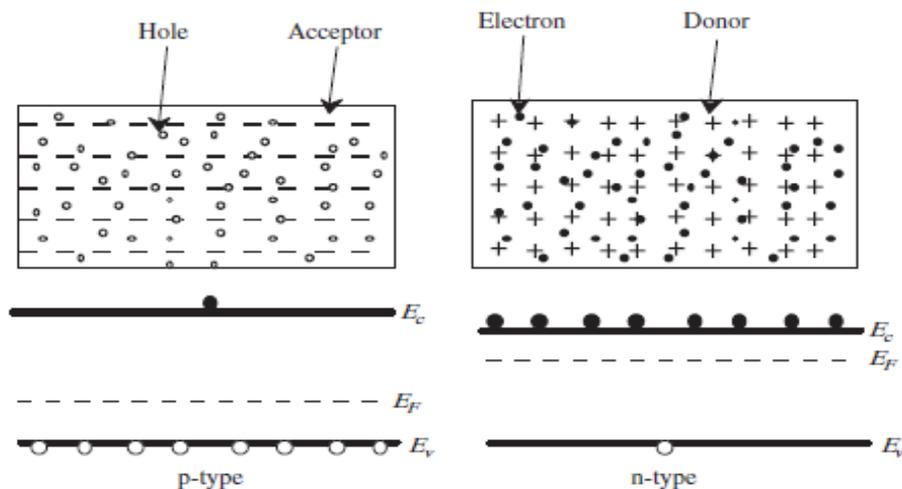


Figure I.5 – Bande d'énergie et les porteurs majoritaires pour les semi-conducteurs de type n et les semi-conducteurs de type p [21].

En raison des atomes d'impuretés ionisées, une couche sans porteurs de charges mobiles est formée lorsque les électrons et les trous diffusent à travers la jonction. Cette charge d'espace appelée aussi zone de déplétion établit un champ électrique qui s'oppose à la diffusion à travers la jonction, comme le montre la figure I.6 (a). Lorsque le courant de dérive dû au champ électrique est équilibré par le courant de diffusion en raison du gradient de concentration de chaque porteur, l'équilibre thermique est établi. À ce stade, les niveaux de Fermi du semi-conducteur de type p et du semi-conducteur de type n sont égaux, comme le montre la figure I.6 (b) [21]. La zone frontière de passage de la région de type n à la région de type p s'appelle aussi jonction métallurgique. Lorsque le matériau semi-conducteur est le même pour les deux zones dopées différemment, cette jonction est appelée homo-jonction. Quand les matériaux sont différents, on parle d'hétérojonction [20].

La différence de potentiel électrostatique  $V_b$  entre le semi-conducteur de type p et le semi-conducteur de type n à l'équilibre thermique, est égale à la différence de la fonction de travail du côté p et du côté n et est donné par :

$$V_b = \frac{kT}{q} \ln \frac{N_A N_D}{n_i^2} \quad (I.4)$$

Où  $N_A$  et  $N_D$  sont respectivement, les concentrations de l'accepteur et du donneur dans le semi-conducteur de type p et le semi-conducteur de type n.

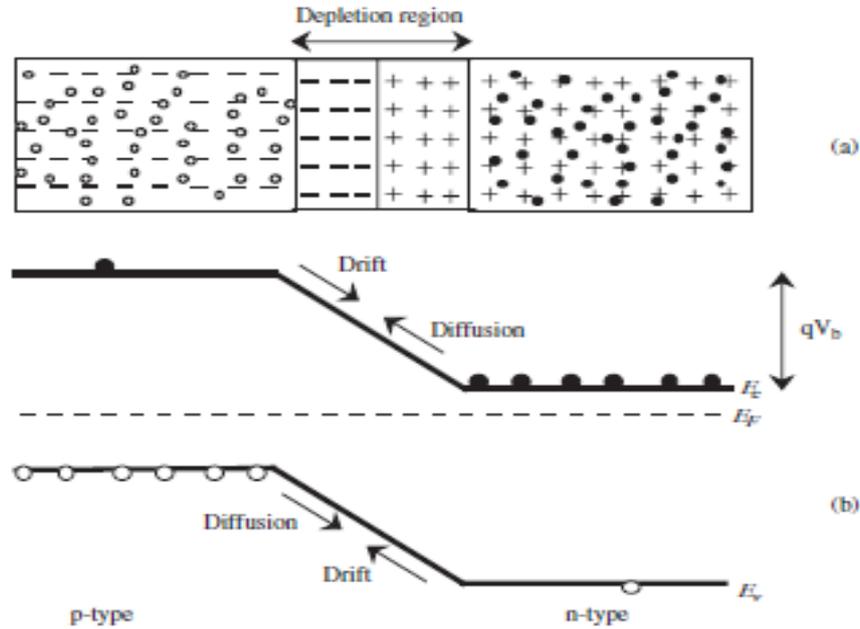


Figure I.6 – Diagramme d'énergie de la jonction à l'équilibre thermodynamique [21].

La largeur totale de la zone de déplétion  $w$  est donnée par :

$$w = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{q} \left( \frac{1}{N_A} + \frac{1}{N_D} \right) V_b} \quad (I.5)$$

La largeur de la zone de déplétion augmente lorsque la concentration du donneur ou de l'accepteur est réduite. Lorsque la concentration d'impuretés d'un côté est beaucoup plus élevée que celle de l'autre côté, par exemple, dans le cas d'une jonction  $p^+ - n$ , où  $N_A \gg N_D$ , la largeur totale de la couche de déplétion est donnée par [21]:

$$w = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{qN_D} V_b} \quad (I.6)$$

### I.5 Principe de la conversion photovoltaïque

Une cellule solaire typique est constituée d'un matériau absorbant entre deux électrodes. Le matériau absorbant peut être un semi-conducteur ou un colorant, organique ou inorganique, et il peut être monocristallin, polycristallin, nanocristallin ou amorphe. L'absorbeur collecte (absorbe) la lumière solaire et doit donc avoir une énergie de séparation de bande ( $E_g$ ) qui correspond au spectre solaire. La séparation des charges en porteurs

individuels et leur transport peuvent être effectués ou non par l'absorbeur. Les électrodes sont fabriquées à partir de matériaux conducteurs avec différentes fonctions de travail, et l'une d'elles doit être transparente à la lumière incidente (figure I.7). Le processus de conversion photovoltaïque peut être divisé en quatre étapes séquentielles [22] :

1. l'absorption de lumière provoque une transition d'électrons dans le matériau absorbant de la cellule de l'état fondamental à l'état excité ;
2. l'état excité est converti en une paire de porteurs de charge distincts, les uns négatifs et les autres positifs ;
3. sous un mécanisme de transport approprié, les porteurs de charge se déplacent séparément vers les contacts électriques de la cellule; le porteur négatif à la cathode et le porteur positif à l'anode ;
4. les électrons parcourent le circuit externe à la cellule, où ils perdent de l'énergie et effectuent un travail utile (c'est-à-dire pour alimenter une lampe ou un moteur). Ensuite, ils atteignent la cathode, où ils se recombinaient avec les porteurs de charge positifs et ramènent le matériau absorbant à l'état fondamental.

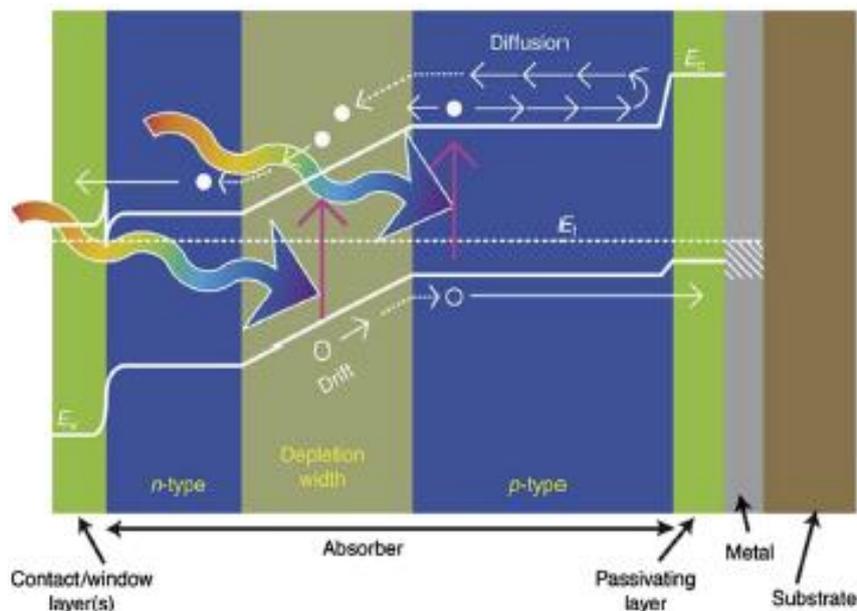


Figure I.7 – Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque [23].

## I.6 Paramètres de la cellule photovoltaïque

La cellule solaire est un dispositif à deux bornes qui fonctionne comme une diode à l'obscurité et génère un photo-courant lorsqu'il est éclairé. Dans une diode idéale, un très petit courant, appelé courant de saturation ( $I_0$ ) circule à travers la jonction en polarisation inverse.

L'équation I.7 donne l'expression du courant d'obscurité,  $I_{obs}$ , traversant la diode en fonction de la tension appliquée,  $V$  ; où  $q$ ,  $k$  et  $T$  sont respectivement, la charge électronique, la constante de Boltzmann et la température [10].

$$I_{obs} = I_0 \left( e^{\frac{qV}{kT}} - 1 \right) \quad (I.7)$$

Lorsqu'une charge est présente, une différence de potentiel se développe entre les bornes de la cellule. La différence de potentiel génère un courant qui agit dans la direction opposée au photo-courant, et le courant net est réduit par rapport à sa valeur de court-circuit [24].

### I.6.1 Courant de court-circuit et tension de circuit ouvert

Le courant de court-circuit et la tension en circuit ouvert sont les deux paramètres les plus importants utilisés pour décrire les performances des cellules solaires [13]. Le circuit est appelé un court-circuit lorsque  $V = 0$ . En général, puisque  $I_{CC}$  est proportionnel à la surface de la cellule solaire ( $A$ ), la densité de courant de court-circuit  $J_{CC} = \frac{I_{CC}}{A}$  est souvent utilisée pour comparer différentes cellules solaires. Sous éclairage, la densité nette de courant résultante dans la cellule est donnée par l'équation I.8.

$$J = J_{CC} - J_0 \left( e^{\frac{qV}{kT}} - 1 \right) \quad (I.8)$$

L'application d'une polarisation directe à une jonction p-n éclairée entraîne une diminution de la barrière de potentiel et une augmentation du courant de diffusion. À une certaine tension appliquée, appelée  $V_{CO}$ , le courant d'obscurité et le photo-courant s'annulent, et par conséquent le courant net dans la cellule s'annule. C'est la tension maximale pouvant être atteinte par la cellule.  $V_{CO}$  d'une cellule solaire idéale est exprimée par l'équation I.9.

$$V_{CO} = \frac{kT}{q} \ln \left( \frac{J_{CC}}{J_0} + 1 \right) \quad (I.9)$$

### I.6.2 Circuit équivalent

Electricquement, la cellule solaire peut être représentée par un circuit qui décrit son comportement ; ce circuit est appelé circuit équivalent (Figure I.8). Le circuit équivalent d'une cellule solaire est représenté par la diode et ses courants d'obscurité ( $J_D$ ) et de court-circuit ( $J_{CC}$ ), ainsi que deux résistances, l'une en série ( $R_S$ ) et l'autre en parallèle ( $R_P$ ).  $R_S$  représente la résistance des contacts, la résistance spécifique des semi-conducteurs et la résistance des interfaces.  $R_P$  représente toute fuite de courant dans la cellule solaire à cause des défauts ou

des recombinaisons dans la structure. Dans le cas idéal,  $R_p$  doit être la plus importante possible ( $R_p = \infty$ ) alors que  $R_s$  doit être la plus faible possible ( $R_s = 0$ ).

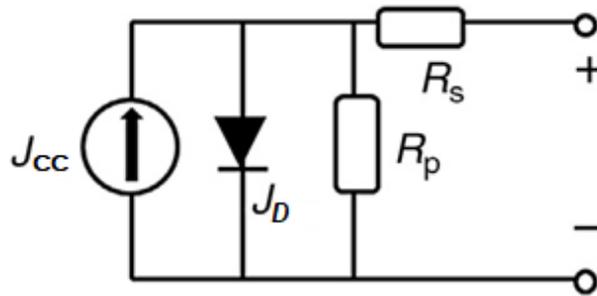


Figure I.8 – Circuit équivalent d'une cellule solaire [13].

La figure I.9 montre la courbe courant-tension typique d'une cellule solaire à l'obscurité et sous illumination, appelée caractéristique courant-tension. La courbe passe par trois points significatifs, à savoir la densité de courant de court-circuit ( $J_{cc}$ ), la tension en circuit ouvert ( $V_{co}$ ) et le point de puissance maximale (PPM) ( $V_{pm}$  et  $I_{pm}$ ).

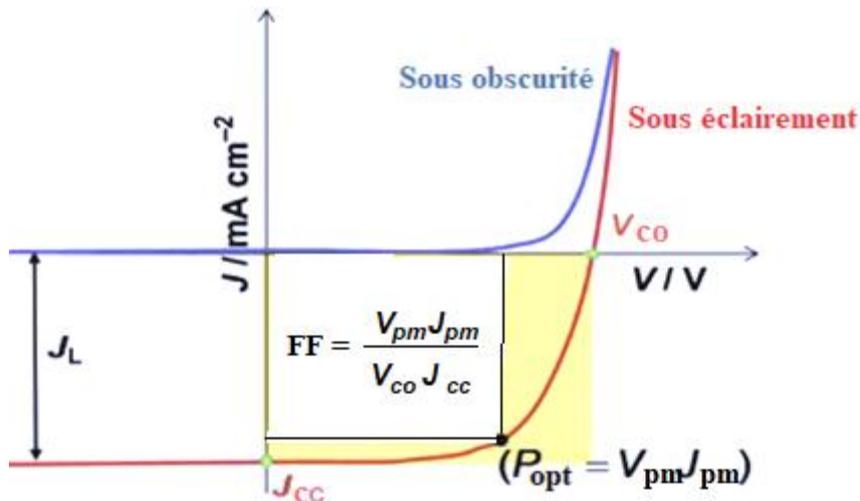


Figure I.9 – Caractéristique J-V.

La puissance produite par la cellule en watts peut être facilement calculée le long du balayage  $J$ - $V$  par l'équation  $P = JV$ . La puissance sera nulle aux points  $J_{cc}$  et  $V_{co}$ , et la valeur maximale de puissance se produira entre les deux. La tension et le courant à ce point de puissance maximale (optimale) sont respectivement  $V_{pm}$  et  $J_{pm}$ , comme indiqué sur la figure I.9 [10].

### I.6.3 Facteur de forme

Le facteur de forme est défini comme le rapport entre la puissance maximale (puissance de crête) de la cellule solaire et le produit du  $V_{CO}$  et  $J_{CC}$ . Il est exprimé comme suit :

$$FF = \frac{V_{pm} \times I_{pm}}{V_{CO} \times J_{CC}} \quad (I.10)$$

Une tension  $V_{CO}$  plus élevée entrainera un  $FF$  plus élevé. Cependant, la résistance parasite réduit le  $FF$ . Le maximum de  $FF$  est obtenu pour la plus petite résistance série ( $R_S$ ) et la plus grande résistance parallèle ( $R_P$ ) ; sa valeur est supérieure à 0.7 pour de bonnes cellules [24].

### I.6.4 Efficacité

L'efficacité de conversion ( $\eta$ ) est le rapport entre la puissance de sortie optimale,  $P_{opt}$ , et l'énergie solaire incidente (puissance d'entrée,  $P_e$ ), dans la cellule PV.

$$\eta = \frac{P_{opt}}{P_e} = \frac{V_{CO} \times J_{CC} \times FF}{P_e} \quad (I.11)$$

### I.6.5 Efficacité quantique et réponse spectrale

La capacité d'une cellule photovoltaïque à convertir efficacement le rayonnement solaire en courant électrique est décrite par l'efficacité quantique externe (EQE ( $\lambda$ ),  $\eta_{ext}$ ) et la réponse spectrale (SR). Ainsi, on peut définir des efficacités quantiques externes et internes (notées respectivement EQE ( $\lambda$ ) et IQE ( $\lambda$ )). EQE ( $\lambda$ ) est une mesure de la façon dont la cellule PV convertit la lumière incidente en courant, y compris toutes les pertes, elle est définie comme suit :

$$\eta_{ext} = \frac{I_{CC}}{I_{ph}} \quad (I.12)$$

$I_{ph}$  est le photo-courant maximum possible, en supposant que tous les photons incidents sur la cellule créent des paires électron-trou avec une énergie supérieure à l'énergie de la bande interdite du matériau photovoltaïque [25].

Seuls les photons non réfléchis sont pris en compte dans la valeur de l' $IQE$  ( $\lambda$ ). Si l'efficacité quantique interne est connue, le courant photo-généré total est donné par :

$$I_{ph} = q \int_{(\lambda)}^{\Phi} (\lambda) \{1 - R(\lambda)\} IQE(\lambda) d\lambda \quad (I.13)$$

Où  $\Phi(\lambda)$  est le flux de photons incident sur la cellule à la longueur d'onde  $\lambda$ ,  $R(\lambda)$  est le coefficient de réflexion de la surface supérieure. L'intégration est réalisée sur toute la longueur d'onde  $\lambda$  de la lumière absorbée par la cellule photovoltaïque. Les valeurs de l' $IQE$  et de l' $EQE$  sont régulièrement mesurées pour évaluer la performance d'une cellule solaire en utilisant des filtres d'interférence ou des monochromateurs. La figure I.10 (a) montre l' $EQE$  idéal et pratique d'une cellule photovoltaïque.

La réponse spectrale (notée  $SR(\lambda)$  d'unité  $A/W$ ) est définie comme le rapport du photocourant généré par une cellule solaire sous un éclairage monochromatique d'une longueur d'onde donnée à la valeur de l'éclairement spectral à la même longueur d'onde. Puisque le nombre de photons et d'irradiance sont liés, la réponse spectrale peut être écrite en termes d'efficacité quantique.

$$SR(\lambda) = \frac{q\lambda}{hc} QE(\lambda) = 0.808 \times \lambda \times QE(\lambda) \quad (I.14)$$

Où  $\lambda$  est en micromètres. La réponse spectrale dans (I.14) peut être interne ou externe, selon la valeur utilisée pour l'efficacité quantique.

La figure I.10(b) montre le SR idéal d'une cellule photovoltaïque en fonction de la longueur d'onde [25], [26].

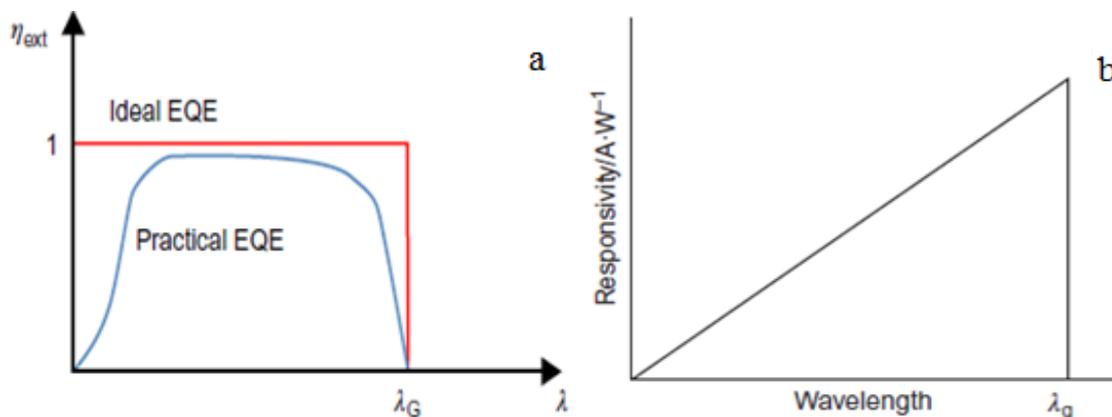


Figure I.10 – (a) EQE idéal et pratique d'une cellule photovoltaïque ; (b) Réponse spectrale idéale d'une cellule PV à toutes les longueurs d'onde jusqu'à la longueur d'onde de la bande interdite ( $\lambda_g$ ) [25].

### I.7 Catégories des cellules photovoltaïques

L'efficacité d'une cellule solaire est le paramètre principal qui caractérise son fonctionnement. La limite théorique d'efficacité pour les cellules solaires à simple jonction est généralement appelée limite de Shockley Queisser (SQ). Sur la figure I.11, l'efficacité

maximale d'une cellule solaire à simple jonction calculée en utilisant le modèle de Shockley-Queisser en fonction de l'énergie de la bande interdite est montrée. Les calculs ont été effectués en supposant que le spectre solaire incident est approximativement de 1.5 AM, et qu'une paire d'électron-trou est excitée par photon entrant. Les points représentent les meilleures cellules expérimentales à simples jonctions fabriquées à ce jour [27].

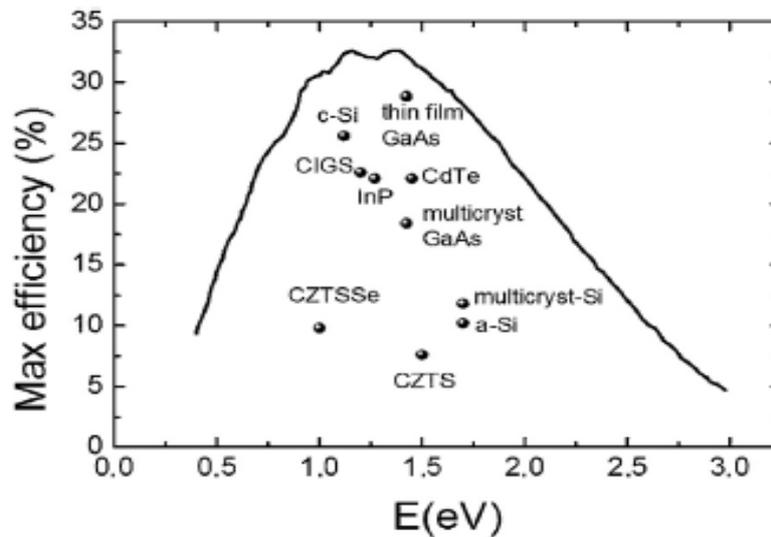


Figure I.11 – Courbe d'efficacité S-Q pour une cellule solaire à simple jonction sous un éclairage AM1.5 à partir de la page Wiki. Les points représentent les meilleures cellules expérimentales à simple jonction fabriquées à ce jour [27].

Les cellules solaires sont généralement divisées en trois catégories principales appelées générations. Les cellules solaires de la première génération (entièrement commercialisées) utilisent la technologie des plaquettes, à cette catégorie appartiennent principalement les cellules de silicium cristallin (c-Si) (mono- et multi-cristallins). Les cellules solaires de la deuxième génération repose sur des technologies de cellules solaires à couches minces et comprend généralement trois familles principales : (1) silicium amorphe (a-Si) et micromorphe (a-Si /  $\mu$ c-Si) ; (2) tellurure de cadmium (CdTe) ; et (3) Cuivre-Indium-Sélénium (CIS) et Cuivre-Indium-Gallium-Disélénium (CIGS). Les cellules solaires de la troisième génération comprennent des technologies, telles que les cellules solaires organiques ou concentrées qui sont encore en démonstration ou qui n'ont pas encore été largement commercialisées, ainsi que de nouveaux concepts sont en cours de développement [28]. Le diagramme ci-dessous présente les différentes catégories des cellules PV. Dans la suite, nous donnons les définitions de quelques types de cellules solaires appartenant aux trois générations.

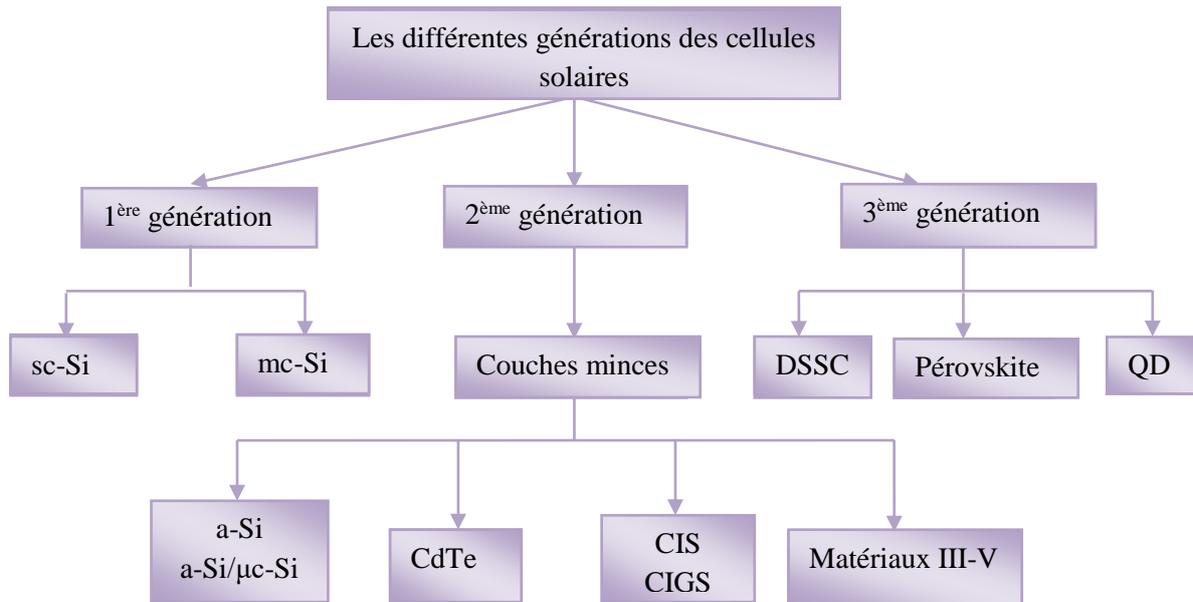


Figure I.12 – Catégories des cellules photovoltaïques.

### I.7.1 Cellules solaires au silicium

Les cellules solaires au silicium ont l'avantage d'utiliser un matériau absorbant stable, non toxique et abondant. Le silicium a une bande interdite d'énergie de 1.12 eV est utilisé dans des formes de plaquettes monocristallines, quasi-monocristallines et multicristallines, et dans des formes polycristallines, amorphes et dans des formes mixtes polycristallines / minces amorphes. La cellule solaire au silicium passe par plusieurs améliorations depuis 1954 jusqu'à ce jour. Une efficacité de conversion de 25.0% pour des cellules solaires au silicium cristallin de géométrie PERL a été établie par l'Université de New South Wales (UNSW), Australie, en 1999. Dans le concept PERL (figure I.13(a)), plusieurs améliorations sont ajoutées pour réduire la recombinaison et minimiser la réflexion telle que la texturation de forme pyramide de la surface supérieure, le dépôt d'une couche de revêtement antireflet (ARC), le dépôt d'une couche de passivation d'oxydes de silicium ou de nitrures de silicium au sommet de l'émetteur et à l'arrière de la couche absorbante ainsi que la minimisation de la surface de l'interface métal-semi-conducteur et le fort dopage des interfaces.

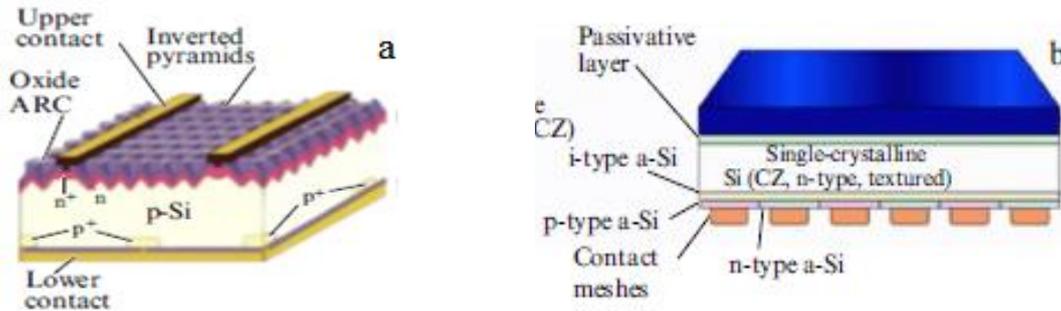


Figure I.13 – (a) cellule solaire PERL, (b) cellule solaire avec la structure HIT de Panasonic Co. (Japon) [29].

Afin d'augmenter le rendement de la cellule PV au silicium, la technologie de contact arrière interdigitée (IBC) a été utilisée ; la société américaine Sun Power a démontré une efficacité de 25.25% sous 1-Soleil. Récemment, une nouvelle conception de la cellule solaire au silicium a été élaborée ; c'est l'hétérojonction avec une couche mince intrinsèque, appelée cellule solaire HIT. En 2014, Panasonic a démontré une nouvelle efficacité de 25.6% en combinant sa technologie HIT avec le concept IBC. La figure I.13(b) montre la structure de cette cellule solaire [27].

### I.7.2 Cellules solaires au silicium amorphe et au silicium microcristallin.

Le silicium amorphe (a-Si) est l'une des premières technologies de couches minces développées. Cette technologie se distingue du silicium cristallin par le fait que les atomes de silicium sont disposés d'une manière aléatoire. Ce caractère aléatoire dans la structure atomique a un effet majeur sur les propriétés électroniques du matériau, provoquant une bande interdite plus élevée (1.7 eV) que celle du silicium cristallin (1.12 eV). Son coefficient d'absorption est supérieur à celui du silicium cristallin, ce qui lui permet d'absorber plus fortement et de nécessiter des films d'épaisseur plus faible (moins que 0.4 mm). La recherche et le développement ont commencé depuis le premier dépôt de silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) signalé en 1975 (Spear et LeComber, 1975), suivi de la démonstration d'une cellule solaire p-i-n par Carlson et Wronski en 1976. Dans les années 1990, le silicium microcristallin hydrogéné ( $\mu$ c-Si:H) - parfois appelé silicium nanocristallin hydrogéné (nc-Si:H) - est apparu comme un matériau de choix qui absorbe la lumière (Wang et Lucovsky, 1990 ; Meier et al. 1994) à des longueurs d'onde plus importantes par rapport à a-Si:H. Grâce aux différentes énergies de bande interdite de a-Si:H ( $\sim$ 1.7 eV) et  $\mu$ c-Si:H (1.1 eV), ces matériaux ont été intégrés dans des cellules solaires doubles (Fischer et al. 1996 ; Yamamoto et al. 2004), triples (Saito et al. 2005 ; Kim et al. 2013) et quadruple (Si et al. 2014 ; Schüttauf et al. 2015 ;

Kirner et al. 2015). Cependant, leur efficacité est encore faible par rapport aux autres technologies basées sur des matériaux absorbants inorganiques comme le silicium cristallin, les matériaux III-V, Cu(In, Ga)Se<sub>2</sub> et CdTe (Green et al. 2017). Les faibles performances des dispositifs en silicium en couche mince sont principalement attribuées à deux problèmes : la métastabilité induite par la lumière dans a-Si:H, connue sous le nom d'effet Staebler-Wronski (Staebler et Wronski, 1977), et la faible absorption infrarouge du  $\mu\text{-Si:H}$  en raison de sa nature de bande interdite indirecte [28], [30], [31].

### I.7.3 Cellules solaires au CdTe

Le tellurure de cadmium (CdTe) est un semi-conducteur à bande interdite directe (II-VI). Son énergie de bande interdite de 1.45 eV est assez favorable pour la conversion du spectre solaire en électricité. Sa très haute absorption optique ( $10^5/\text{cm}$ ) et sa conductivité de type p en font un matériau idéal pour les applications photovoltaïques. La structure de base (figure I.14(a)) comporte un substrat de verre et une couche d'oxyde conducteur transparent (TCO) en contact avant, une couche de sulfure de cadmium (CdS) presque transparente de type n, du CdTe de type p et un contact métallique arrière. Le CdTe représente aujourd'hui une part de marché d'environ 7 %. Une efficacité record de 21% pour une cellule solaire basée sur le CdTe appartient à First Solar depuis son annonce en 2014. En février 2016, First Solar a annoncé un nouveau record de 22.1%. L'efficacité enregistrée du module est actuellement de 18.6 % [27], [29], [31], [32].

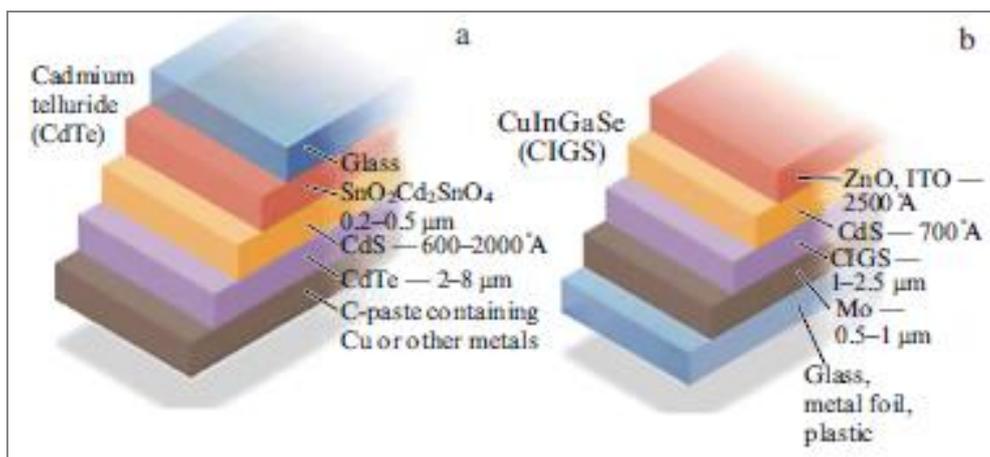


Figure I.14 – Structures typiques des cellules solaires à base de CdTe (a) et de CIGS (b).

#### I.7.4 Cellules solaires au CIGS

Le CIGS ( $(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x})\text{Se}_2$ , cuivre indium gallium diselenide), ou CIS si le gallium est absent, est un cristal semi-conducteur appartenant à la famille des matériaux des groupes I-II-VI<sub>2</sub> à structure chalcopyrite. Il est utilisé comme matériau pour la deuxième génération de cellules solaires à couche mince. L'arrangement des régions de type p et de type n, est réalisé avec des matériaux différents (CIGS de type p et CdS de type n), en une structure dite hétérojonction (figure I.14(b)). Le coefficient d'absorption de  $\text{CuInSe}_2$  est supérieur à  $10^5\text{cm}^{-1}$ , et le meilleur rendement d'une cellule solaire à couche mince CIGS est de 22.6%, résultat annoncé par le centre de recherche sur l'énergie solaire et l'hydrogène du Bade-Wurtemberg (ZSW) en 2016 [27], [28], [31].

#### I.7.5 Cellules solaires III-V multi-jonctions

L'efficacité théorique d'une cellule solaire à simple jonction est d'environ 31%. De meilleures efficacités pourraient être obtenues avec une utilisation plus efficace du spectre solaire. La combinaison de deux ou plusieurs cellules de gaps différents dans un arrangement à plusieurs jonctions augmente la quantité de travail effectué par photon [33]. Le concept de cellules solaires multi-jonctions repose sur l'idée de convertir toute l'énergie d'un spectre solaire en énergie électrique. La cellule solaire multi-jonction la plus simple est composée de trois (3J) jonctions de trois gaps d'énergie différents correspondant à différentes parties du spectre solaire (figure I.15). Pour de telles cellules solaires à triple jonction, les rendements approchent les 40% sous une lumière concentrée. Les cellules solaires multi-jonctions sont très coûteuses et cela limite leur application à l'espace. Afin de réduire leur coût, des concentrateurs solaires sont utilisés et, par conséquent, l'efficacité des cellules MJ est généralement mesurée sous la lumière concentrée. La lumière solaire concentrée augmente l'efficacité d'une cellule solaire et réduit la surface de la cellule, ce qui réduit le coût en raison d'une quantité réduite de matériau semi-conducteur.

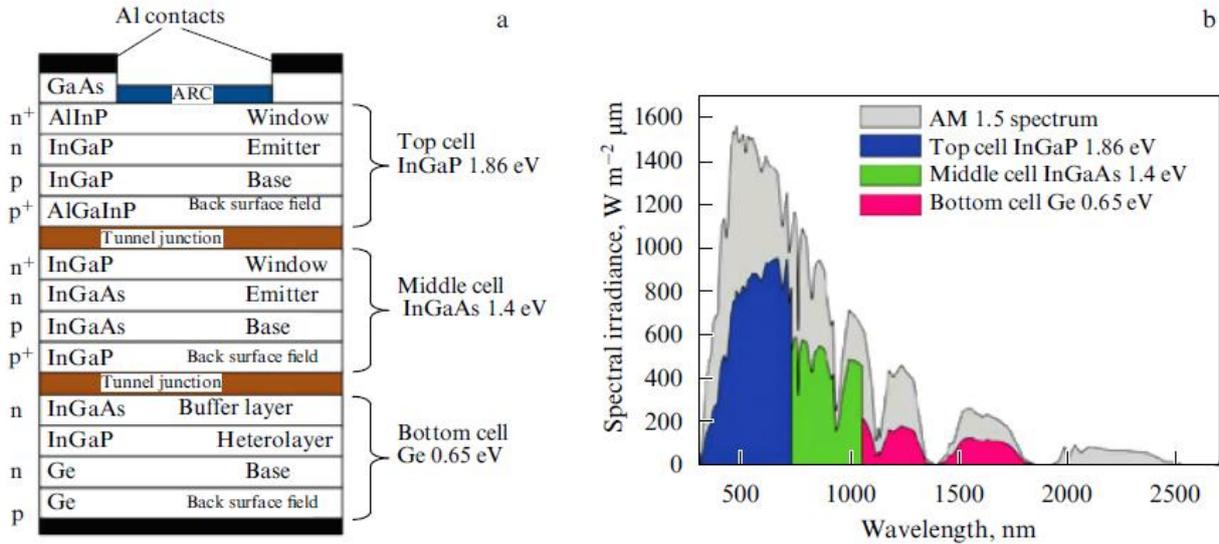


Figure I.15 – (a) Structure d'une cellule solaire à trois jonctions ; b) les différentes parties du spectre solaire absorbées dans cette cellule.

Afin d'atteindre une grande efficacité, le nombre de sous-cellules est augmenté. Les meilleures cellules solaires multi-jonctions atteignent une efficacité au-delà de la limite de Shockley-Quiesser. En 2015, l'Institut Nano Tech et Nano Bionics de Suzhou a annoncé une structure de cellules solaires 5J InGaP (1.64 eV) / InGaP (1.64 eV) / InGaAsP (1.3 eV) / InGaAsP (1.02 eV) / InGaAs (0.74 eV) sur InP. Son efficacité atteignant 46.2% est estimée en concentration à  $\sim 1500$  soleils. La structure de cette cellule solaire est représentée sur la figure I.16 [27].

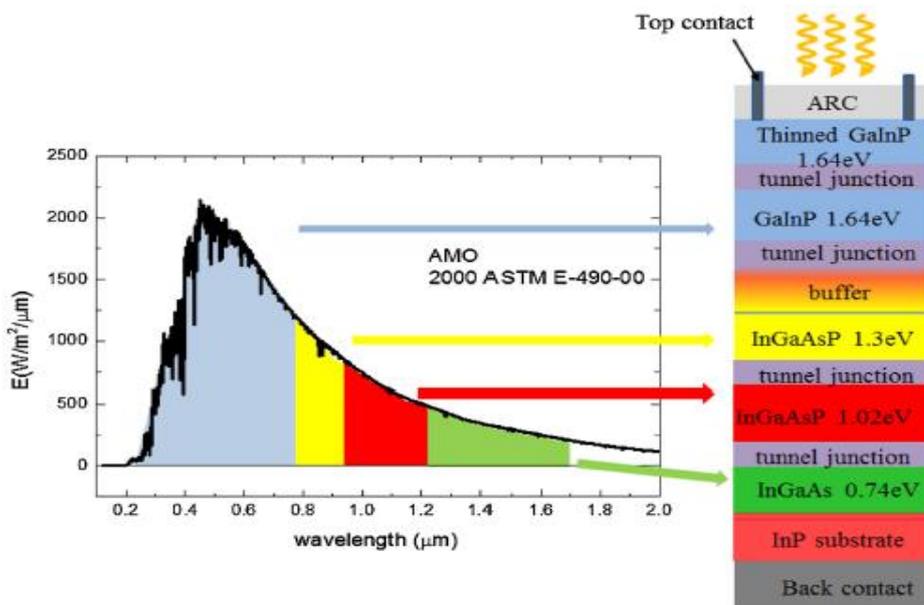


Figure I.16 – Répartition du spectre AM0 par la cellule solaire 5J et la structure des différentes couches de la cellule.

### **I.7.6 Cellules solaires de kesterite**

Une entrée récente dans le domaine des matériaux photovoltaïques potentiellement commerciaux est un groupe de matériaux  $I_2-II-IV-VI_4$  à structure de kesterite,  $Cu_2ZnSnSe_4$  et  $Cu_2ZnSnS_4$ , communément appelé CZTS. Ces composés sont très prometteurs car les coûts des matières premières sont extrêmement faibles, les éléments sont abondants et non toxiques. Leur bande interdite peut être ajustée de 1.0 eV ( $Cu_2ZnSnSe_4$ ) à 1.5 eV ( $Cu_2ZnSnS_4$ ) et le coefficient d'absorption est supérieur à  $10^4 \text{ cm}^{-1}$ . En avril 2016 IMRA Europe a annoncé une efficacité de 9.8% d'une cellule solaire CZTSSe et l'Université de Nouvelle-Galles du Sud, en Australie a annoncé une efficacité de 7.6% d'une cellule solaire CZTS [27], [31].

### **I.7.7 Cellules solaires organiques**

Ce type de cellules utilise des semi-conducteurs organiques tels que de petites molécules de colorant organique ou de polymère conjugué, dans la fonction absorbeur / donneur. Le fullerène est l'accepteur le plus populaire, bien que d'autres polymères et de petites molécules conjuguées, des nanotubes de carbone et des nanoparticules d'oxyde métallique puissent également être utilisés dans cette fonction. Les premiers modèles de ce type de cellules ont été proposés dans les années 1980, avec des films de pigments organiques placés entre deux électrodes métalliques de fonctions différentes. Cependant, l'efficacité de ces cellules était très faible ( $< 0.1\%$ ). Ce chiffre n'a été dépassé qu'au début des années 2000 avec l'introduction de cellules solaires à hétérojonction massives à base de mélanges de polymères conjugués et de fullerènes. Aujourd'hui, les meilleures efficacités de conversion sont de 12% pour les cellules à base de petites molécules et de 9.2% pour les cellules à base de polymères conjugués [22].

### **I.7.8 Cellules solaires à colorant (DSSC)**

La cellule solaire à colorant (DSSC) est un dispositif photovoltaïque semi-conducteur qui convertit directement le rayonnement solaire en courant électrique. L'efficacité de conversion du DSSC de la lumière visible à l'électricité dépend de la sensibilisation des semi-conducteurs à large bande interdite, de la photoélectrode, de l'électrolyte redox et de la contre-électrode. Les mécanismes DSSC se sont étendus sous plusieurs améliorations au cours des années afin d'augmenter l'efficacité de la cellule. Une meilleure efficacité de conversion de 11.9% a été annoncée par Sharp [27], [28].

### I.7.9 Cellules solaires à base de pérovskite

Les cellules solaires en pérovskite sont issues de cellules solaires sensibles aux colorants, mais elles ont des structures à l'état solide prometteuses ainsi que des sauts de rendement rapides (Figure I.17) [34]. Les majeurs avantages de la technologie pérovskite sont l'abondance de la matière première, la bande passante directe, le coefficient d'absorption élevé, la cristallinité quasi parfaite à basse température, le faible coût, et la fabrication facile [35], [36]. Depuis les premiers rapports sur les cellules solaires à l'état solide en pérovskite avec un rendement de 10% en 2012, il y a eu une augmentation rapide des rendements rapportés. L'efficacité record certifiée selon le NREL dépasse maintenant les 22 % [37]. Les applications des cellules solaires à la pérovskite étaient principalement focalisées sur le  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ , mais il reste quelques problèmes à résoudre tels que la toxicité des atomes de plomb et leur durabilité à long terme. Cependant, seule l'utilisation de pérovskite à base de plomb a permis d'obtenir un rendement élevé jusqu'à présent. C'est pourquoi d'importantes recherches se sont concentrées sur le remplacement du plomb par l'étain dans les cellules solaires en pérovskite [36].

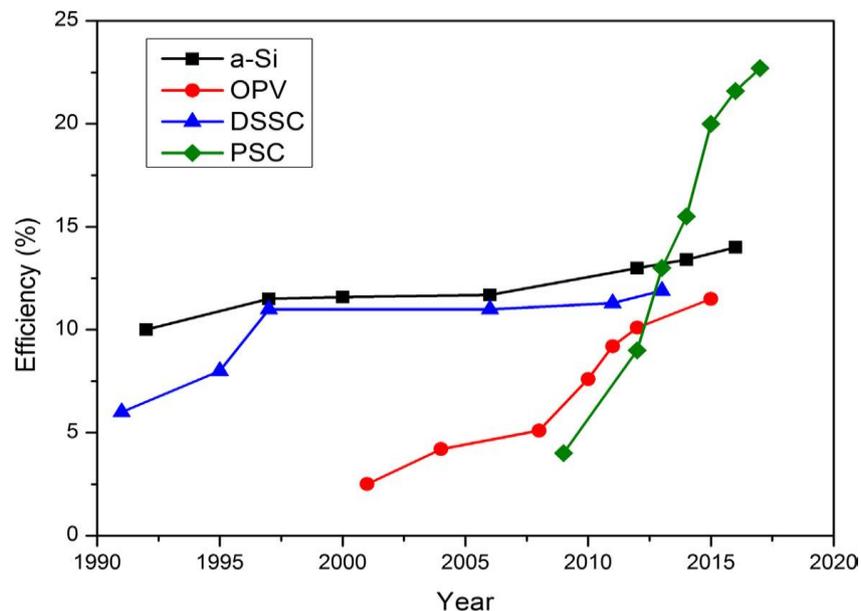


Figure I.17 – Comparaison des progrès de l'efficacité des cellules solaires en pérovskite avec les autres technologies PV à couche mince [34].

## I.8 Conclusion

Nous avons vu dans ce chapitre des notions générales sur l'énergie solaire, les semi-conducteurs et les cellules solaires. D'abord, nous avons présenté le spectre solaire arrivant sur la Terre et les semi-conducteurs avec leurs différents aspects comme le dopage et la bande

interdite. Après, nous avons présenté la jonction p-n. nous avons également abordé le fonctionnement d'une cellule photovoltaïque avec les équations physiques permettant de définir ses paramètres. Enfin ; pour connaître le contexte global de la filière photovoltaïque, l'état de l'art des différentes technologies disponibles a été décrit.

# II. Le matériau InGaN pour les applications photovoltaïques

---

<b>II.1 INTRODUCTION</b> .....	<b>26</b>
<b>II.2 PROPRIÉTÉS STRUCTURELLES</b> .....	<b>26</b>
II.2.1 STRUCTURE CRISTALLINE.....	26
II.2.2 PROPRIÉTÉS MÉCANIQUES .....	27
II.2.3 POLARISATION .....	29
<b>II.3 PROPRIÉTÉS ÉLECTRIQUES</b> .....	<b>32</b>
II.3.1 STRUCTURE DE BANDE DES NITRURES-III DE TYPE WURTZITE .....	32
II.3.2 BANDE INTERDITE D'INGAN.....	32
II.3.3 CONCENTRATION D'ÉLECTRONS DANS LES NITRURES .....	34
II.3.4 RECOMBINAISON .....	34
<b>II.4 PROPRIÉTÉS OPTIQUES</b> .....	<b>36</b>
II.4.1 INDICE DE RÉFRACTION .....	36
II.4.2 FONCTION DIÉLECTRIQUE.....	37
II.4.3 GAP D'ABSORPTION.....	37
<b>II.5 PROPRIÉTÉS THERMIQUES</b> .....	<b>38</b>
<b>II.6 HÉTÉROÉPITAXIE DES NITRURES D'ÉLÉMENTS III</b> .....	<b>39</b>
II.6.1 SUBSTRATS DE CROISSANCE.....	39
II.6.2 MÉTHODES DE CROISSANCE .....	40
II.6.3 ÉPAISSEUR CRITIQUE .....	41
II.6.4 DÉSACCORD DE MAILLE .....	43
II.6.5 DÉFAUTS STRUCTURAUX.....	44
<b>II.7 DOPAGE DANS LES NITRURES D'ÉLÉMENTS III</b> .....	<b>47</b>
<b>II.8 THÉORIES SUR LES CELLULES SOLAIRES À BASE D'INGAN</b> .....	<b>47</b>
II.8.1 CELLULES SOLAIRES HOMO-JONCTION À BASE D'INGAN .....	48
II.8.2 CELLULES SOLAIRES HÉTÉROJONCTION À BASE D'INGAN.....	51
II.8.3 INTÉRÊT DU MATÉRIAU INGAN POUR LES CELLULES SOLAIRES TANDEM.....	54
<b>II.9 CONCLUSION</b> .....	<b>55</b>

---

## II.1 Introduction

Dans ce chapitre ; nous nous intéressons aux nitrures III, spécialement le nitrure de gallium (GaN), le nitrure d'indium (InN) et le composé ternaire InGaN. Ce dernier semi-conducteur porte une grande importance dans le domaine photovoltaïque grâce à sa large bande gap qui couvre presque tout le spectre solaire ; ce qui permet de fabriquer des cellules solaires multi-jonctions en faisant varier la composition d'indium dans l'alliage. Plusieurs avantages ainsi que les difficultés rencontrées lors de la fabrication des cellules solaires à base de ce matériau, et d'autres propriétés des matériaux GaN, InN, et leur alliage le nitrure de gallium-indium (InGaN) sont présentés dans ce chapitre. Enfin, nous allons aborder l'état de l'art des cellules solaires à base d'InGaN.

## II.2 Propriétés structurales

### II.2.1 Structure cristalline

Les nitrures d'éléments III, GaN, InN, AlN et leurs alliages peuvent cristalliser suivant deux structures différentes : la structure hexagonale (wurtzite) (Figure II.1) et la structure cubique (blende de zinc). Ces matériaux cristallisent le plus souvent dans leur phase wurtzite qui est la structure la plus stable thermodynamiquement [38], [39]. Cette structure est décrite par la constante de réseau  $a$ , le rapport  $c/a$ , et le paramètre interne  $u$  qui indique la distance relative le long de l'axe  $c$  entre deux sous-réseaux hexagonaux compacts, le premier réseau est constitué des éléments III (Ga, Al, In) et le second des éléments V (N) [40].

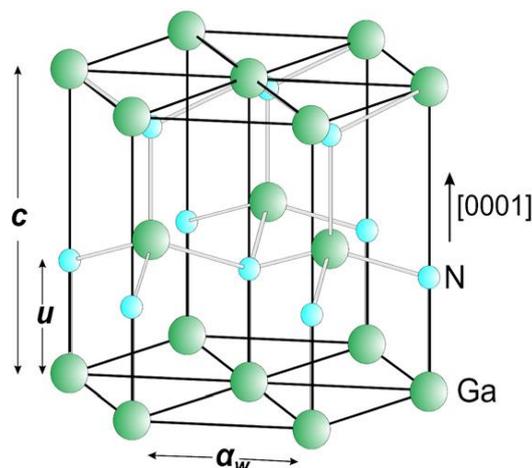


Figure II.1 – Structure atomique wurtzite [41].

Elle aussi est définie par un système de coordonnées hexagonales ayant trois vecteurs de réseau de plan de base équivalents  $a_1$ ,  $a_2$ ,  $a_3$  et un vecteur de translation unique  $c$ . Dans la notation des trois indices  $(a_1, a_2, c)$ , les atomes de métal sont localisés à  $(0, 0, 0)$  et  $(1/3, 2/3,$

1/2), et les positions des atomes d'azote sont : (0, 0, u) et (2/3, 1/3, 1/2 + u) [42]. Le tableau ci-après donne les paramètres structuraux de la forme wurtzite pour GaN et InN.

Tableau II.1– Paramètres de réseau de la structure wurtzite pour GaN et InN [43], [44].

Paramètres	GaN	InN
a (Å)	3.189	3.544
c (Å)	5.185	5.705
u	0.376	0.377

La figure II.2 présente les plans à faible indice de la structure wurtzite, incluant le plan c (0001) appelé également plan polaire ; cette polarité est due à l'asymétrie le long de l'axe c, c.à.d. les deux directions non équivalentes (0001) et (000 $\bar{1}$ ). Le plan m {1010} et le plan a {11 $\bar{2}$ 0} sont dits aussi plans non polaires, et sont perpendiculaires au plan c. On y trouve les plans semi-polaires tels que {1-101} et {11-22} [42]. Le plan c de base (0001) est l'orientation cristalline la plus couramment utilisée, car il se croît facilement sur le saphir (0001) ou le SiC (0001) [45].

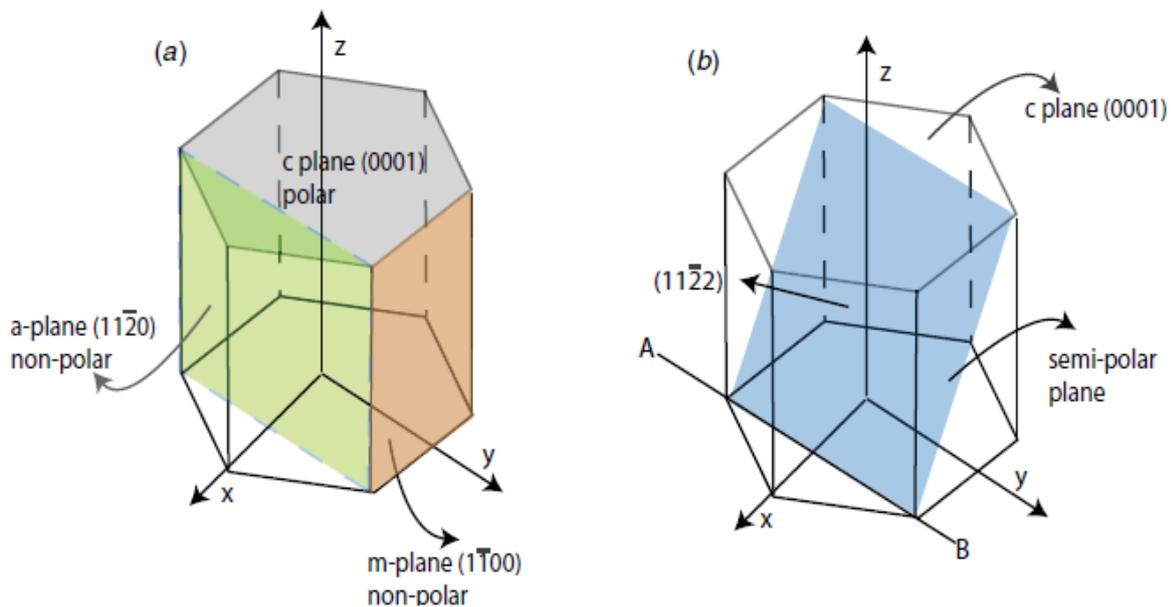


Figure II.2 – (a) Plans polaires et non polaires et directions cristallographiques dans un cristal de GaN (b) Exemples de plans de cristaux de GaN semi-polaires à faible indice [46].

## II.2.2 Propriétés mécaniques

La structure des bandes et les propriétés électroniques des semi-conducteurs dépendent dans une large mesure de leur état de contrainte. Pour déterminer la structure de bande des cristaux déformés, il faut connaître les composants du tenseur de contrainte [47].

Selon la loi de Hooke la déformation du cristal  $\epsilon_{kl}$  due aux forces externes ou internes ou aux contraintes  $\sigma_{ij}$  peut être décrite par [48] :

$$\sigma_{ij} = \sum_{kl} C_{ijkl} \cdot \epsilon_{kl} \quad (\text{II.1})$$

Où  $\sigma_{ij}$  est la contrainte dans le matériau,  $\epsilon_{kl}$  est la déformation et  $C_{ijkl}$  le tenseur élastique. Dû à la symétrie spéciale, ce quatrième rang de tenseur peut être réduit à une matrice  $[6 \times 6]$  qui utilise la notation :  $xx \rightarrow 1$ ,  $yy \rightarrow 2$ ,  $zz \rightarrow 3$ ,  $yz, zy \rightarrow 4$ ,  $zx, xz \rightarrow 5$ ,  $xy, yx \rightarrow 6$ . Les éléments du tenseur élastique peuvent être réécrits comme suit :

$$C_{ijkl} = C_{mn}, \text{ où } i, j, k, l = x, y, z \text{ et } m, n = 1, \dots, 6. \quad (\text{II.2})$$

Utilisant cette notation, la loi de Hooke peut être simplifiée à :

$$\sigma_i = \sum_j C_{ij} \cdot \epsilon_j \quad (\text{II.3})$$

La matrice  $[6 \times 6]$  des constantes élastiques  $C_{ij}$  pour les cristaux de structure hexagonale est donnée par :

$$C_{ij} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12}) \end{pmatrix} \quad (\text{II.4})$$

Grâce aux symétries du cristal, le tenseur d'élasticité est donné par cinq paramètres:  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{13}$ ,  $C_{33}$  et  $C_{44}$  [38], [48], [49].

paramètre	AlN	GaN	InN
$C_{11}$ (GPa)	396	390	223
$C_{12}$ (GPa)	137	145	115
$C_{13}$ (GPa)	108	106	92
$C_{33}$ (GPa)	373	398	224
$C_{44}$ (GPa)	116	105	48
$d_{15}$ (pm/V)	3.6	3.1	5.5
$d_{13}$ (pm/V)	-2.1	-1.6	-3.5
$d_{33}$ (pm/V)	5.4	3.1	7.6

Etant donné aussi que la force de contrainte est seulement appliquée latéralement, et par conséquent la force dans l'axe 3 est nulle, alors :

$$\sigma_3 = c_{13}\epsilon_1 + c_{13}\epsilon_2 + c_{33}\epsilon_3 = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \epsilon_3 = \frac{-c_{13}}{c_{33}}(\epsilon_1 + \epsilon_2) = \frac{c-c_0}{c_0} \quad (\text{II.5})$$

Où  $c$  et  $c_0$  sont les hauteurs de la cellule primitive contrainte et initiale.

Nous avons aussi :

$\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon = \frac{a-a_0}{a_0}$ , à cause de l'isotropie transversale, où  $a$  et  $a_0$  sont les paramètres de maille contraint et initial, respectivement.

### II.2.3 Polarisation

Les nitrures d'éléments III dans leur structure wurtzite sont non centro-symétriques. Ils présentent alors deux séquences différentes de déposition atomiques dans les deux directions opposées parallèles aux axes cristallographiques, et par conséquent la polarité cristallographique le long de ces axes peut être observée. Pour le composé binaire Ga-N de type wurtzite, la séquence des couches atomiques des constituants Ga et N est inversé le long des directions  $(0001)$  et  $(000\bar{1})$  qui correspond aux face-Ga et face-N, respectivement [43]. En effet, si la première couche atomique déposée est composée d'azote, alors la dernière sera composée d'atomes de gallium ; on aura ainsi un excès de trous à la surface. Cette configuration est appelée polarisation Ga et la direction de croissance sera  $[0001]$ . Inversement, si la première couche est composée de gallium, la dernière sera composée d'azote et présentera donc un excès d'électrons. On aura alors une polarisation N et l'axe de croissance sera appelé  $[000\bar{1}]$  [50], comme le montre la figure II.3.

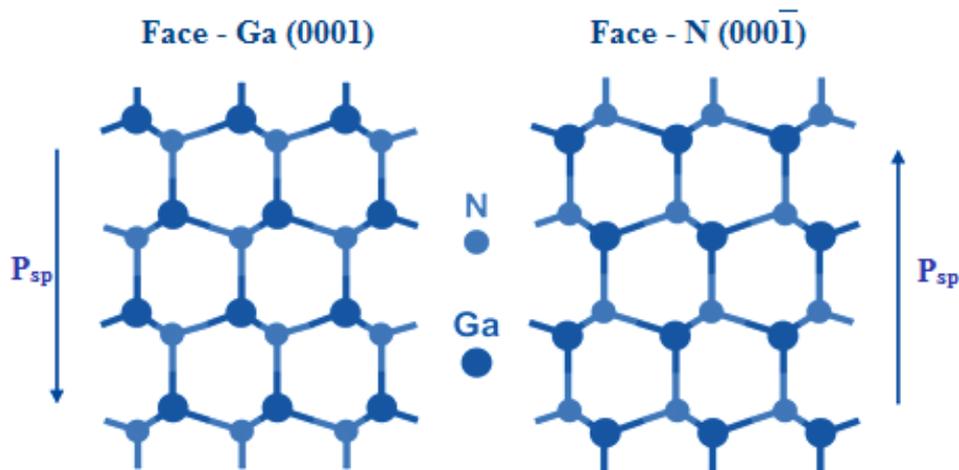


Figure II.3 – Polarisation spontanée selon les deux directions  $(0001)$  et  $(000\bar{1})$  [43].

#### II.2.3.1 Polarisation spontanée

La nature polaire des matériaux III-V est appelée polarisation spontanée ( $P_{sp}$ ). Elle se présente dans le matériau sans polarisation externe appliquée. Le sens de cette polarisation

dépend du sens de croissance, (0001) ou (000 $\bar{1}$ ) (figure II.3). Dans le cas du matériau ternaire  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , la polarisation spontanée est décrite par une relation non linéaire reliant la composition et les valeurs des constantes  $P_{sp}$  des deux binaires GaN et InN, dont le troisième terme correspond à une correction quadratique liée à une constante  $b$  appelée paramètre de courbure comme le montre l'expression suivante [51]–[53].

$$P_{sp}^{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} = x * P_{sp}^{\text{InN}} + (1 - x) * P_{sp}^{\text{GaN}} - b * x * (1 - x) \quad (\text{II.6})$$

Où  $x$  est la composition d'indium,  $b$  est le paramètre de courbure,  $P_{sp}^{\text{InN}}$  et  $P_{sp}^{\text{GaN}}$  sont les polarisations spontanées d'InN et de GaN respectivement.

Le paramètre de courbure  $b$  pour le matériau ternaire  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  a été calculé par Ambacher et al. [52] et est égal à  $0.037C / \text{m}^2$ .

### II.2.3.2 Polarisation piézoélectrique

En plus de la polarisation spontanée, un autre type de polarisation manifesté dans les nitrures-III de structure WZ, c'est la polarisation piézoélectrique. Cet effet résulte essentiellement de l'existence d'un champ électrique qui apparait par des contraintes mécaniques (extension ou compression), et réciproquement, de la déformation de matériaux sous l'effet d'une tension électrique appliquée. Il est dû au manque de symétrie dans la structure cristalline, à la nature fortement ionique des liaisons chimiques et aux différences assez importantes dans les paramètres de réseau des matériaux III-N [54], [55]. La polarisation piézoélectrique est donnée par :

$$P_{Pzi} = \sum_{j=1}^6 d_{ij} \sigma_j \quad [C/cm^2] \quad i = 1,2,3 \quad (\text{II.7})$$

Où  $d_{ij}$  sont les coefficients piézoélectriques qui expriment l'évolution du vecteur de polarisation électrique en fonction des contraintes  $\sigma_j$ , exprimés en  $[N/cm^2]$ .

Etant donné que la polarisation est parallèle à l'axe 3(z), et sachant que la structure WZ est transversalement isotrope, nous avons [48], [56], [57] :

$$\begin{pmatrix} P_x^{pz} \\ P_y^{pz} \\ P_z^{pz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 & 0 \\ d_{13} & d_{13} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} \quad (\text{II.8})$$

Enfin nous avons :

$$P_{pz} = d_{31}(\sigma_1 + \sigma_2) = 2\epsilon \left( e_{31} - \frac{c_{13}}{c_{33}} e_{33} \right); \text{ avec } e_{ij} = \sum_k d_{ik} c_{kj} \quad (\text{II.9})$$

Où  $\epsilon$  est la constante diélectrique présentée sous forme matricielle compacte et exprimée en  $[C/cm^2]$ .

La polarisation piézoélectrique pour l'alliage InGaN peut être estimée avec la relation linéaire de Vegard [52]:

$$P_{pz}^{In_xGa_{1-x}N} = x * P_{pz}^{InN} + (1 - x) * P_{pz}^{GaN} \quad (\text{II.10})$$

Tableau II.2 – Paramètres nécessaires pour le calcul des polarisations [43], [44], [50], [58].

	$a_0$ (Å)	$c_0$ (Å)	$u_0$ (Å)	$e_{31}$ (C m <sup>-2</sup> )	$e_{33}$ (C m <sup>-2</sup> )	$P_{sp}$ (C m <sup>-2</sup> )
GaN	3.189	5.185	0.376	-0.49	0.73	-0.029
				-0.32		-0.034
InN	3.544	5.705	0.377	-0.57	0.97	-0.032
						-0.042

La polarisation spontanée est toujours négative par rapport à la direction C (0001), comme le montre le tableau II.2 ; et comme le terme  $\left( e_{31} - \frac{e_{33}c_{13}}{c_{33}} \right)$  est aussi toujours négatif, la polarisation piézoélectrique peut être négative (contrainte extensive) ou positive (contrainte compressive) [43].

### II.2.3.3 Polarisation totale

La polarisation totale  $P$ , est la résultante de la somme des deux types de polarisations : piézoélectrique et spontanée, elle s'écrit donc :

$$\vec{P} = \vec{P}_{SP} + \vec{P}_{PZ} \quad (\text{II.11})$$

A l'hétéro-interface d'une jonction abrupte (p-GaN/i-InGaN/n-GaN), l'effet de polarisation est représenté comme une densité de charge donnée par :

$$\rho_{pol} = -\nabla \vec{P} = -\nabla (\vec{P}_{sp} - \vec{P}_{pz}) \quad (\text{II.12})$$

Pour une jonction graduelle, elle se présente comme une densité de charges volumiques positives ou négatives qui se comportent comme des accepteurs ou des donneurs. Elle est calculée comme suit [43], [50] :

$$\sigma = \vec{P}_{dessus} - \vec{P}_{dessous} = [\vec{P}_{ps} + \vec{P}_{pz}]_{dessus} - [\vec{P}_{ps} + \vec{P}_{pz}]_{dessous} \quad (\text{II.13})$$

## II.3 Propriétés électriques

### II.3.1 Structure de bande des nitrures-III de type Wurtzite

Du fait du couplage spin-orbite et du champ électrique cristallin, le sommet de la bande de valence des matériaux III-V est séparé en trois niveaux d'énergie [47]. La figure II.4 montre la structure de bande de GaN et d'InN dans toute la zone de Brillouin calculée par Fritsch et al. Pour le nitrure de gallium la valeur de la bande interdite varie de 3.4 à 3.51 eV [38], [59]. Le calcul de la bande interdite d'InN donne une valeur de 0.79 pour la structure wurtzite, ce qui est très proche de la valeur de 0.78 eV calculée à 0 K par Vurgaftman et Meyer [1, 19]. Les études expérimentales récentes donnent des valeurs de gap d'InN qui varient de 0.6 à 0.7 eV [60].

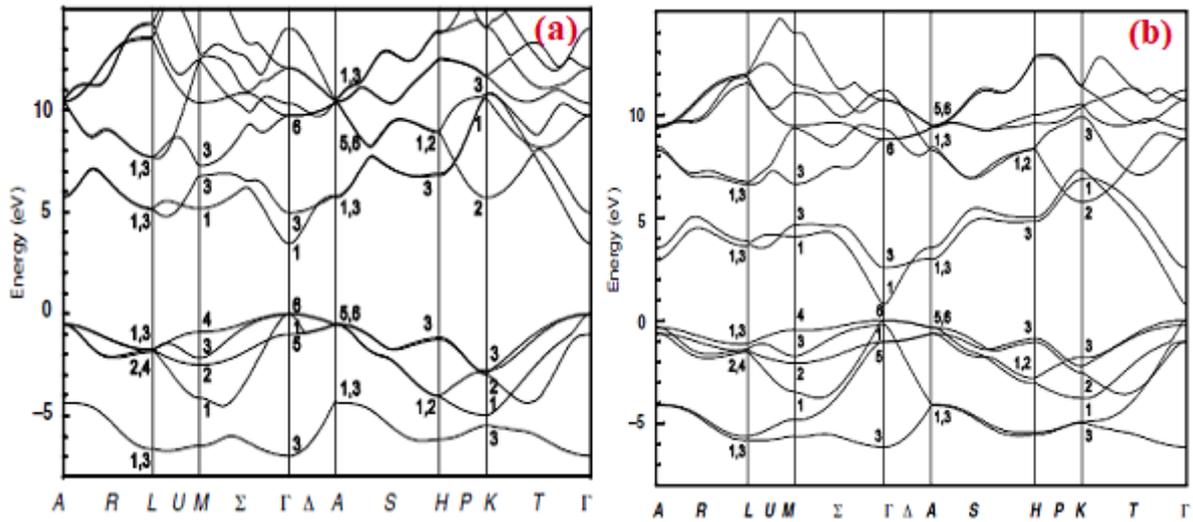


Figure II.4 – Diagramme de bande théorique (a) de GaN (b) d'InN [61].

### II.3.2 Bande interdite d'InGaN

Le gap d'InGaN est déterminé à partir des gaps des composés binaires GaN et InN en utilisant la loi de Vegard. Il est donné par la relation :

$$E_g^{In_xGa_{1-x}N} = x * E_g^{InN} + (1 - x) * E_g^{GaN} \quad (\text{II.14})$$

Après avoir montré que l'alliage est non linéaire, un troisième terme a été ajouté à l'expression précédente. Ce terme appelé paramètre de courbure (b) mesure la déviation de l'interpolation linéaire entre InN et GaN. La loi de Vegard avec le paramètre de courbure est définie par :

$$E_g^{In_xGa_{1-x}N} = x * E_g^{InN} + (1 - x) * E_g^{GaN} - b * x * (1 - x) \quad (\text{II.15})$$

Avec $x$	la concentration d'indium dans $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ [s.d.]
$b$	le paramètre la courbure [eV]
$E_g^{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}$	le gap d'InGaN [eV]
$E_g^{\text{GaN}}$	le gap du GaN [eV]
$E_g^{\text{InN}}$	le gap d'InN [eV]

De nombreuses études expérimentales et théoriques ont été réalisées pour déterminer la valeur du paramètre de courbure. Des valeurs de  $b$  variant de 1 à 6 eV ont été rapportées. La grande disparité des valeurs publiées suggère que c'est difficile d'obtenir une valeur universelle de ce paramètre. Il est possible d'attribuer ces variations à plusieurs facteurs tels que l'état de contrainte, la séparation de phase, l'inhomogénéité dans InGaN, les techniques de mesure de la composition d'indium et le gap d'InGaN. Le tableau II.3 présente quelques valeurs reportées dans la littérature [62].

Tableau II.3 – Valeur du paramètre de courbure reportée par différents groupes en fonction de l'épaisseur de la couche, la composition en indium ou l'état de contrainte de la couche.

Etat de contrainte	relaxé	N.A	relaxé	N.A	relaxé
Epaisseur	10-200	1500	250	200-7500	400
[In] (%)	0-0.25	0-0.4	$0.61 < x < 1$	0-0.5	$x > 0.13$ $x < 0.10$
$b$ (eV)	2.8-2.96	2.62	1.8	1.4	6.0 – 4.0
$E_g$	CL	PL	PL	OA	PL
Technique	XRD	XRD	XRD	NA	XRD
Croissance	MOVPE	MOVPO	MBE	MBE	MBE
Références	G. Orsal et al. 2014 [63]	Islam et al. 2012 [64]	Kurouchi et Wi et al. 2004 [65]	et al. 2003 [66]	X.Q. Shen et al. 2002 [67]

Note : XRD: diffraction des rayons-X, CL : cathodoluminescence, PL: photoluminescence, OA : absorption optique, N.A : information non applicable ou non disponible, MOVPE (idem MOVPE) : épitaxie en phase vapeur aux organométalliques, MBE : épitaxie par jets moléculaires.

### II.3.3 Concentration d'électrons dans les nitrures

Les nitrures d'indium et de gallium (GaN, InN) et leurs alliages InGaN sont intrinsèquement de type N. La concentration d'électrons mesurée est de l'ordre de  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  [58], [68], [69]. Elle est principalement due aux défauts structuraux, dont les lacunes d'azote prennent la première place à cause de leur faible énergie de formation dans GaN et InN [58], [70]. Les impuretés comme l'oxygène et le carbone provenant des procédés de croissance sont supposées également participer au caractère de type N [58], [71]. D'après Schaff et al. [69] la concentration d'électrons dans InN est dépendante de l'épaisseur de la couche. En effet, l'augmentation de l'épaisseur des couches entraîne une diminution de la densité des défauts dus au désaccord de maille, et donc la diminution de la concentration des électrons.

### II.3.4 Recombinaison

Les trois principaux procédés de recombinaison/génération dans les nitrures de groupe III sont la recombinaison radiative, Auger et Shockley- Read-Hall (SRH). Le modèle ABC utilisé pour étudier les processus de recombinaison des porteurs dans GaN est donné par l'équation suivante.

$$\frac{dn}{dt} = \left[ \frac{J}{qd} - An - Bn^2 - Cn^3 \right] \quad (\text{II.16})$$

Où  $J$  est la densité de porteurs injectés,  $d$  est la largeur du puits quantique,  $An$  est le taux de recombinaison SRH,  $Bn^2$  est le taux de recombinaison radiative et  $Cn^3$  est le taux de recombinaison Auger [72].

Le mécanisme de recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH) se fait par l'intermédiaire d'un défaut ponctuel [73]. La recombinaison assistée par un défaut dans un matériau avec une bande interdite  $E_g$ , consiste en une capture séquentielle d'un électron et d'un trou (ou inversement). La figure II.5 donne l'exemple d'un défaut avec un seul niveau de transition d'état de charge (+1/0), la capture d'électrons (trou) est donnée par le taux  $R_n = C_n N^+ n$  ( $R_p = C_p N^0 p$ ), où  $n$  ( $p$ ) est la densité des porteurs,  $N^+$  ( $N^0$ ) est la concentration des défauts dans l'état de charge pertinent et  $C_n$  ( $C_p$ ) est le coefficient de capture [74].

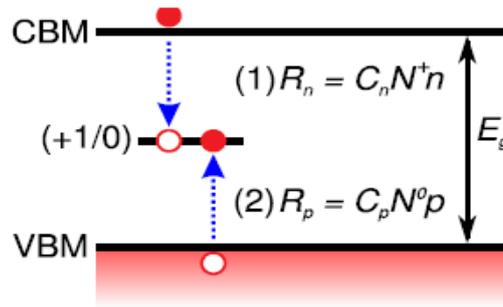


Figure II.5 – Schéma du diagramme de bande d'énergie représentant la recombinaison SRH à un défaut de niveau (+1/0) dans un matériau ayant un gap  $E_g$  [74].

Le taux de recombinaison-génération SRH est donné par :

$$R_{SRH} = \frac{pn - n_i^2}{\tau_p(n + n_i) + \tau_n(p + p_i)} \quad (\text{II.17})$$

Où  $n$  et  $p$  sont les densités des électrons et des trous,  $n_i$  la densité intrinsèque du dopage,  $\tau_n$  et  $\tau_p$  les durées de vie des électrons et des trous [72].

La recombinaison radiative est un paramètre intrinsèque du matériau [74], elle correspond à la transition d'un électron de la bande de conduction vers la bande de valence avec l'émission d'un photon d'énergie proche de celle du gap du matériau (figure II.6) [75].

La recombinaison Auger devient importante à des concentrations élevées de porteurs, ce qui conduit à une perte de porteurs non radiative et à une efficacité énergétique réduite. La recombinaison Auger assistée par phonon est plus puissante que le processus direct dans les nitrures (figure II.6).

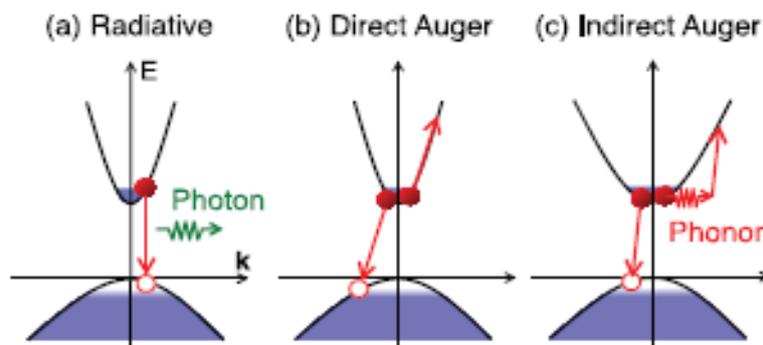


Figure II.6 – Schéma des processus de recombinaison des porteurs dans les semi-conducteurs.

- (a) La recombinaison radiative se produit verticalement dans le diagramme de structure des bandes. (b) Recombinaison Auger directe (c) Recombinaison Auger indirecte [76].

La recombinaison Auger est modélisée selon l'équation suivante :

$$R_{Au} = (C_p p + C_n n)(np - n_i^2) \quad (\text{II.18})$$

Où  $C_p$  et  $C_n$  sont les coefficients Auger pour les trous et les électrons,  $n$  et  $p$  sont les densités des électrons et de trous et  $n_i$  la densité de dopage intrinsèque [72], [76].

## II.4 Propriétés optiques

Les propriétés optiques d'un matériau regroupent 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 dispositif 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 c'est le cas pour les lasers. Cette propriété est aussi très intéressante pour les applications cellules solaires afin d'augmenter l'efficacité d'absorption de la lumière.

### II.4.1 Indice de réfraction

L'indice de réfraction d'un matériau est défini par le rapport de la vitesse de la lumière dans le vide ( $c$ ) sur la vitesse de la lumière dans le matériau ( $v$ ) par :

$$n = \frac{c}{v} \quad (\text{II.19})$$

La vitesse de la lumière dans un matériau n'est pas constante car elle change avec la longueur d'onde. Dans le cas de GaN, l'indice de réfraction est égal à environ 2.3, alors que pour InN il vaut environ 2.9 dans l'infrarouge [77]. Anani et al. [78] ont estimé expérimentalement la variation de l'indice de réfraction des alliages de nitrides d'éléments III en fonction de l'énergie d'un photon absorbé par le matériau ( $E_g = hc/\lambda$ ). Le tracé de l'indice de réfraction en fonction de la composition, reporté sur la figure II.7, montre que l'équation qui relie ces valeurs est de type quadratique  $\geq 2$  (existence d'un paramètre de courbure).

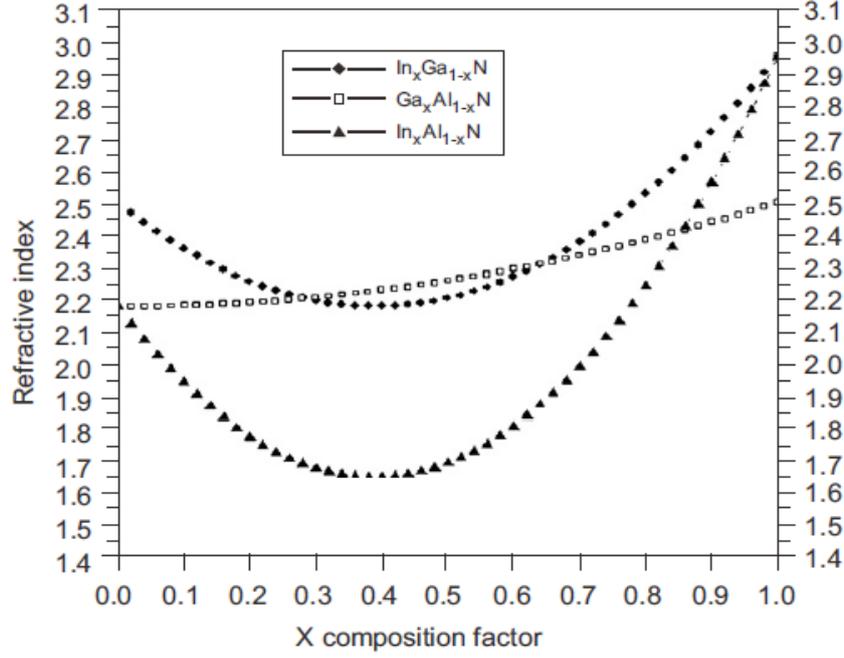


Figure II.7 – Variation de l'indice de réfraction dans InGaN, AlGaIn et InAlN [78].

#### II.4.2 Fonction diélectrique

La fonction diélectrique joue un rôle important dans l'exploration des propriétés optiques d'un composant, elle décrit la réponse du matériau au spectre des photons. La fonction diélectrique a un comportement complexe :

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (\text{II.20})$$

La partie imaginaire de la fonction diélectrique  $\varepsilon_2(\omega)$  indique l'absorption optique dans le cristal. Elle désigne le changement des transitions inter-bandes dans un semi-conducteur, et la partie réelle  $\varepsilon_1(\omega)$  est estimée à travers la partie imaginaire  $\varepsilon_2(\omega)$  en utilisant la transformation de Kramer-Kronig [79].

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'. \quad (\text{II.21})$$

L'indice de réfraction peut être calculé par la partie réelle de la constante diélectrique [80].

$$n = \sqrt{\varepsilon_1} \quad (\text{II.22})$$

#### II.4.3 Gap d'absorption

Pour les cellules solaires, le coefficient d'absorption est un paramètre important puisqu'il va déterminer la quantité de photons absorbés par le matériau et donc la quantité de porteurs pouvant être produits. Le coefficient d'absorption,  $\alpha$ , est défini par :

$$\alpha = \frac{4\pi k(\lambda)}{\lambda} \quad (\text{II.23})$$

Avec  $k$  le coefficient d'atténuation ou d'extinction [s.d].

Le coefficient de réflexion,  $R$ , (transmission,  $T$ ) est défini comme le rapport de l'intensité réfléchie  $I_r$  (transmise,  $I_t$ ) sur l'intensité incidente,  $I_i$  :

$$R = \frac{I_r}{I_i}; T = \frac{I_t}{I_i}. \quad (\text{II.24})$$

Les coefficients de réflexion ( $R$ ) et de transmission ( $T$ ) peuvent se déterminer par l'indice de réfraction :

$$R = \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \text{ et } T = \frac{2n_1}{n_1 + n_2}. \quad (\text{II.25})$$

Avec  $n_1$  et  $n_2$  les indices de réfractons de deux milieux [s.d.]

Un exemple de courbes de transmission et réflexion d'un pseudo substrat de GaN (3.5  $\mu\text{m}$  sur saphir) sont présentées sur la figure II.8. Le seuil de transmission que l'on peut voir dans cette figure autour de 360 nm correspond au gap du GaN.

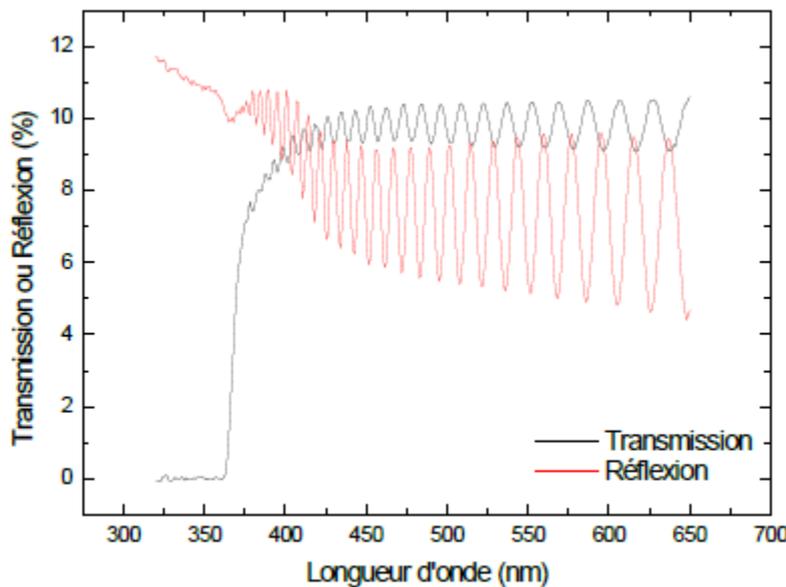


Figure II.8 – Courbe de transmission (noire) et de réflexion (rouge) du GaN.

## II.5 Propriétés thermiques

Le coefficient d'expansion thermique (CET),  $\alpha$ , décrit la dilatation ou la contraction d'un réseau cristallin à une variation de température. Dans le plan cristallin, il est défini par :

$$\alpha_a = \frac{\Delta a}{a \cdot \Delta T} \text{ et } \alpha_c = \frac{\Delta c}{c \cdot \Delta T} \quad (\text{II.26})$$

Avec  $\Delta a$  et  $\Delta c$  la variation des paramètres de maille suite à une variation de température dans

le plan et perpendiculairement au plan [ $\text{\AA}$ ] ;  $\Delta T$  la variation de température [K].

Le CET dépend également de la stœchiométrie, des défauts étendus et de la concentration de charges libres dans le matériau. La différence du CET entre le matériau déposé et le substrat peut créer des contraintes lors du refroidissement de la structure à température ambiante après la croissance, entraînant la création de défauts (dislocations) et détériorant ainsi les performances du composant. Les principales propriétés thermiques sont rassemblées dans le Tableau II.4 [77].

Tableau II.4 – Résumé des propriétés thermiques du GaN et de l’InN.

	GaN	InN
Expansion thermique [s.d]	$\Delta a/a = 5.59 \times 10^{-6}$ $\Delta c/c = 3.17 \times 10^{-6}$	$\Delta a/a = 2.85 \times 10^{-6}$ $\Delta c/c = 3.75 \times 10^{-6}$
Conductivité thermique, k [W.cm <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> ] à 300 K	2.3	0.8
Température de Debye [K]	600	660
Température de fusion [K]	> 1993 à 2 kbar	1373

## II.6 Hétéroépitaxie des nitrures d’éléments III

Les nitrures-III peuvent être obtenus par différentes méthodes de croissance et sur différents substrats. Le choix des substrats dépend de leur qualité, des coûts envisagés et des différences de paramètre de maille avec les nitrures. Cependant ; la différence de paramètres de maille (3.19  $\text{\AA}$  pour GaN et 3.54  $\text{\AA}$  pour InN), et du coefficient de dilatation thermique entre GaN et InN, ainsi que la différence de l’enthalpie de formation entre ces deux matériaux, entraînent un désaccord de maille et une séparation de phase en dépassant une certaine épaisseur, dite épaisseur critique. En effet, il est difficile de fabriquer une couche massive d’InGaN. Elle est donc déposée en film mince sur un substrat. Or il n’existe pas de substrat qui est en accord de maille pour la croissance d’InGaN, une couche tampon est alors utilisée pour adapter les paramètres du substrat et de la couche d’InGaN déposée [7], [62], [64].

### II.6.1 Substrats de croissance

Le saphir, le SiC et le Si sont les principaux substrats utilisés pour la croissance épitaxiale des nitrures d’éléments III. Ils présentent des désaccords de paramètres de réseau importants avec GaN, respectivement de 16%, 3.5% et 17% (Tableau II.5). En outre ; ces substrats étrangers présentent des coefficients de dilatation thermique différents par rapport au GaN, induisant le développement de déformations et de fissures à la surface lors du

refroidissement de l'échantillon après la croissance. Ces défauts importants entraînent des effets néfastes sur la qualité cristalline (densité de dislocations élevée) [45], donc le choix du substrat est effectué en minimisant la différence entre les paramètres de réseau, ainsi que les coefficients de dilatation thermique des couches épitaxiées et des substrats. Les substrats GaN sont aussi utilisés et deviennent de plus en plus abordables (mais avec des coûts beaucoup plus élevés que le saphir ou le silicium). Ils ont une faible densité de dislocations, jusqu'à  $5.10^3 \text{ cm}^{-2}$  pour les substrats massifs. Outre les avantages évidents de l'homoépitaxie (pas de désaccord de paramètres de réseau et même de dilatation thermique), ces substrats offrent une bonne conductivité électrique et thermique, grâce à leurs niveaux de dopage de type n très élevés [61], [81], [82].

Tableau II.5 – Caractéristiques physiques des substrats usuels utilisés pour la croissance du GaN [61], [81].

	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	6H-SiC	Si	GaN	AlN
	(0001)	(0001)	(111)	(0001)	(0001)
Paramètre de maille a (300 K)	4.76	3.08	5.43	3.19	3.11
Désaccord paramétrique/GaN	-16%	-3.40%	17%	0%	-2.40%
Coeff. d'expansion thermique $\alpha_a$ ( $10^{-6}\text{K}^{-1}$ )	5.8	4.46	2.6	5.6	2.9

### II.6.2 Méthodes de croissance

Les deux techniques d'épitaxie les plus utilisées pour la croissance des matériaux III-V sont : l'épitaxie par jet moléculaire (MBE) et le dépôt chimique en phase vapeur avec précurseurs organométalliques (MOCVD).

La technique MOCVD est caractérisée par des vitesses de croissance élevées, elle ne nécessite pas un vide poussé, et les couches produites sont de bonne qualité. Dans le procédé MOCVD, l'ammoniac et les composés organométalliques, généralement le triméthyl (TM) ou le triéthyl (TE) de Ga, Al, et In, sont transportés dans un gaz porteur H<sub>2</sub> ou N<sub>2</sub> et réagissent sur un substrat chauffé en formant du GaN, AlN, ou InN suite à la réaction de Brutto :



Le magnésium (Mg) est souvent utilisé pour le dopage de type p et le Si pour le dopage de type n. Le cyclopentadienyl-magnésium (Cp<sub>2</sub>Mg) et le silane (SiH<sub>4</sub>) sont utilisés entant que précurseurs des éléments dopants, Mg et Si, respectivement [41], [47], [83].

Le procédé MBE, est une croissance sur une surface chauffée et sous un ultraviolet (le vide poussé assure la pureté du matériau). Les atomes de Ga, In, ou Al sont vaporisés et

atteignent la surface du substrat chauffé sur lequel ils se condensent avec des espèces d'azote actif pour former du GaN, InN, ou AlN. Les espèces d'azote actif sont fournies soit par dissociation thermique des molécules de  $\text{NH}_3$  sur le substrat chauffé (c'est-à-dire ammoniac-MBE), soit par décomposition des molécules de  $\text{N}_2$  par une onde radiofréquence (RF) à 13.56 MHz (c'est-à-dire RF-PAMBE). Dans les deux cas, la pression pendant la croissance est de l'ordre de  $10^5$  Torr. La croissance du GaN par PAMBE est généralement réalisée autour de  $700^\circ\text{C}$  [41].

Pour l'alliage InGaN, la croissance est favorable aux basses températures. Comme le MOCVD utilise l'ammoniac comme source d'azote, des températures élevées sont nécessaires pour la pyrolyse du  $\text{NH}_3$  à la surface du substrat. Cela rend le MBE assisté par plasma avantageux par rapport au MOCVD, en particulier pour les fortes teneurs en indium. Ici, l'azote atomique est fourni par une source de plasma. Cependant, il est bien connu que la qualité de la surface devient mauvaise lorsque la température de croissance diminue en raison de la plus faible mobilité superficielle des atomes [84].

### II.6.3 Epaisseur critique

L'épaisseur critique de la croissance épitaxiale d'un matériau est l'épaisseur à partir de laquelle des dislocations sont générées en réduisant l'énergie emmagasinée par la couche. En dessous de cette épaisseur, la couche se déforme élastiquement pour adapter son paramètre de maille à celui du substrat, on dit cette couche est pseudo morphique. Pour une épaisseur supérieure à l'épaisseur critique, le matériau se relaxe plastiquement en créant des défauts, principalement des dislocations pour reprendre ses paramètres de maille nominaux [85]. La figure II.9 présente l'épaisseur critique d'InGaN en *nm* tracée en fonction de la concentration d'indium.

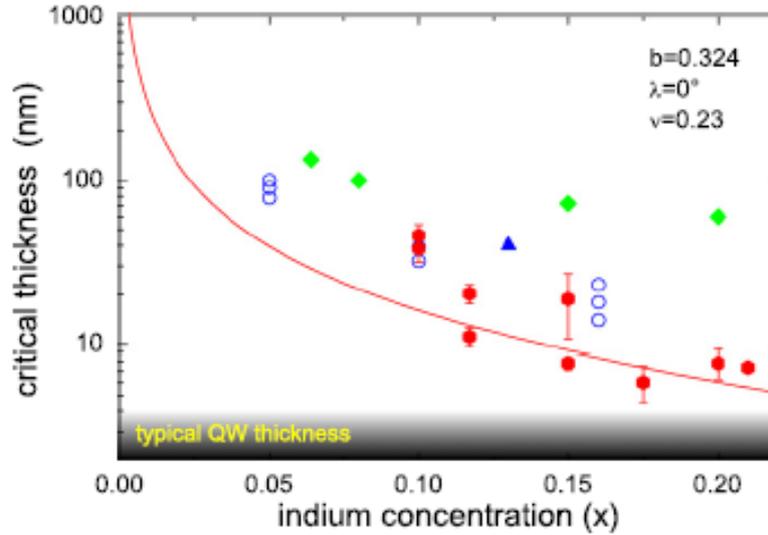


Figure II.9 – L'épaisseur critique d'InGaN en fonction de la concentration d'indium. Les diamants verts sont des mesures de [86], les cercles creux sont obtenus de [87], les triangles bleus sont de [88] et les hexagones rouges sont obtenus de [89]. La ligne continue correspond au tracé théorique [90].

Le meilleur tracé théorique de l'épaisseur critique de relaxation plastique ( $h_c$ ) en fonction de la composition ( $x$ ) consiste en un modèle de Fischer [89], [90]. L'équation est de la forme :

$$x = \left( \frac{b \cdot \cos \lambda}{0.836 \cdot h_c} \right) \times \left( 1 + \frac{1 - \nu}{4\pi \cdot \cos^2 \lambda (1 + \nu)} \cdot \ln \left( \frac{h_c}{b} \right) \right) \quad (\text{II.28})$$

Avec

$b$  norme du vecteur de Burger.

$\lambda$  angle entre le vecteur de Burgers et l'interface.

$\nu$  coefficient de Poisson de l'alliage.

$x$  concentration en indium dans l'alliage  $In_xGa_{1-x}N$ .

L'InGaN croît sur du GaN et souffre d'une contrainte de compression, qui augmente avec l'épaisseur de l'InGaN et/ou la composition de l'indium. Si l'épaisseur de l'InGaN dépasse une épaisseur critique ( $h_c$ ), le modèle de croissance changera pour relaxer la contrainte de compression importante. En général, il y a principalement deux façons de relaxation de la contrainte. L'une est la génération de dislocations qui entraîne une détérioration de la qualité du cristal ; l'autre est la croissance tridimensionnelle (3D) qui rend la surface rugueuse. Cependant, ces deux épaisseurs critiques différentes basées sur des mécanismes physiques complètement différents ont souvent été confondues dans les travaux précédents. Par exemple, l'épaisseur critique pour la génération de dislocations a été utilisée pour estimer si

une croissance tridimensionnelle peut être induite. La figure II.10 présente les deux épaisseurs critiques de la génération de dislocations et de la croissance en 3D de l'InGaN sur GaN en fonction de la composition d'indium dans la couche [91].

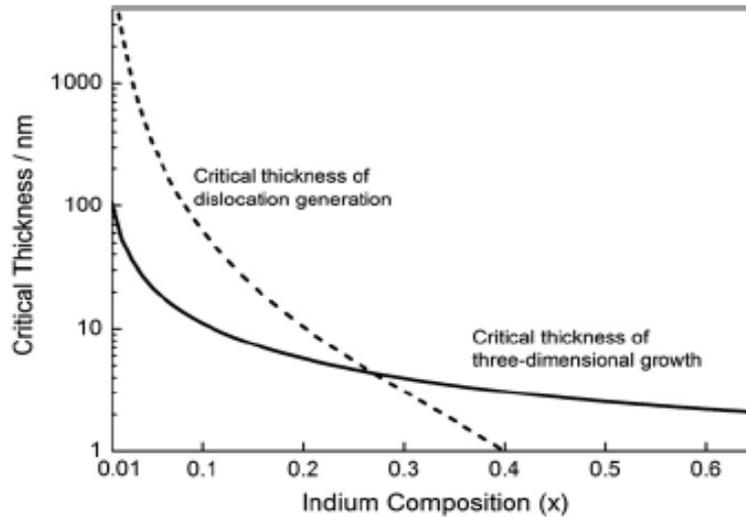


Figure II.10 –Les deux épaisseurs critiques de la génération de dislocations et de la croissance en 3D en fonction de la composition d'indium [91].

#### II.6.4 Désaccord de maille

Deux cas distincts apparaissent lors de la déposition d'une couche mince de paramètre de maille ( $a_F$ ) sur un substrat de paramètre de maille ( $a_S$ ) (figure II.11) [92].

- si  $a_F < a_S$  le paramètre de maille dans le plan du film va subir une contrainte en tension pour s'adapter au paramètre de maille dans le plan du substrat : le film est dit en tension,
- si  $a_F > a_S$  le paramètre de maille dans le plan du film va subir une contrainte en compression pour s'adapter au paramètre de maille dans le plan du substrat : le film est dit en compression.

Le désaccord paramétrique entre la couche et le substrat s'exprime par la relation suivante :

$$\frac{\Delta a}{a} = \frac{a_F - a_S}{a_S} \quad (\text{II.29})$$

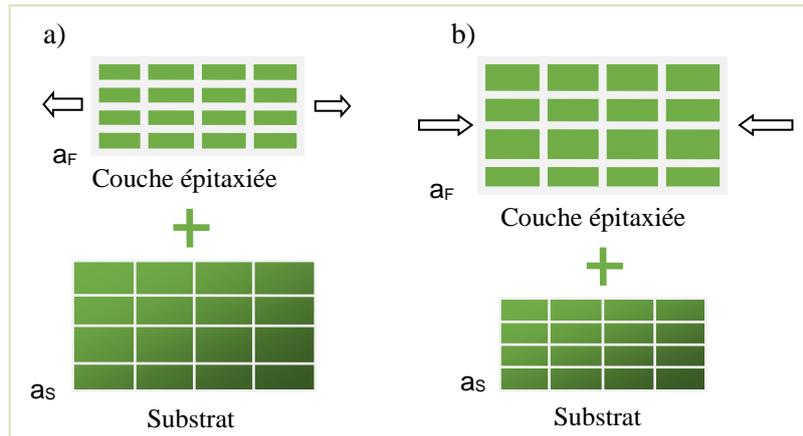


Figure II.11 – Contrainte liée au désaccord de maille : Cas (a), ( $a_F < a_S$ ), la maille est en tension. Cas (b), ( $a_F > a_S$ ), la maille est en compression.

Dans le cas du matériau InGaN élaboré sur GaN, la déformation engendrée par ( $\frac{\Delta a}{a}$ ) est de 11% signifiant qu'une couche active d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  avec  $x = 0.2$  possède un désaccord paramétrique considérable de 2.2%. Pour chaque incorporation supplémentaire de 10% d'indium dans l'InGaN élaboré sur GaN, le désaccord de maille augmente de 1.1% comme le montre la figure II.12.

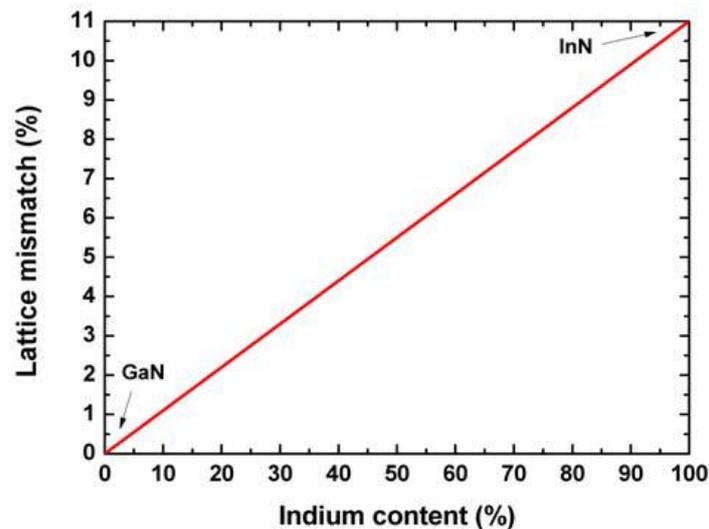


Figure II.12 – Variation du désaccord de maille d'InGaN élaboré sur un pseudo-substrat de GaN.

### II.6.5 Défauts structuraux

Les couches de nitrure épitaxiales présentent plusieurs types de défauts qu'on peut classer en deux catégories.

- Défauts ponctuels qui sont [93] :
  - Les lacunes (sites atomiques inoccupés,  $V_{Ga}$  ou  $V_N$  dans GaN) ;

- Les anti-sites (un atome occupe le site d'un autre atome ; par exemple, dans GaN, un atome d'azote à la place d'un atome de gallium  $N_{Ga}$ , ou vis versa).
- Les impuretés par substitution (un atome étranger occupe un site atomique).
- Les défauts interstitiels (un atome du matériau qui n'occupe pas un site cristallin régulier mais un site entre des atomes réguliers, par exemple).
- Défauts étendus qui sont généralement des dislocations dues au substrat en désaccord de maille.

### II.6.5.1 Dislocations

En l'absence de substrat adapté, la croissance des nitrures d'éléments III se traduit par la présence de nombreux défauts structuraux qui sont généralement des dislocations traversantes induites par le désaccord de maille entre le film épitaxié et le substrat.

Une dislocation est un défaut de type linéaire correspondant à une discontinuité dans l'organisation de la structure cristalline caractérisée par un vecteur unitaire  $\vec{u}$  parallèle à la ligne de dislocation, et par un vecteur de Burger  $\vec{b}$  dont la norme  $b$  représente l'amplitude de la déformation locale du réseau [94], [95].

Dans le cas des nitrures d'éléments III, il existe 3 types de dislocations (figure II.13) :

- type coin (ou type a) : les vecteurs  $b$  et  $u$  sont perpendiculaires,
- type vis (ou c) : les vecteurs  $b$  et  $u$  sont parallèles,
- type mixte (ou a+c) : comporte une composante vis et coin.

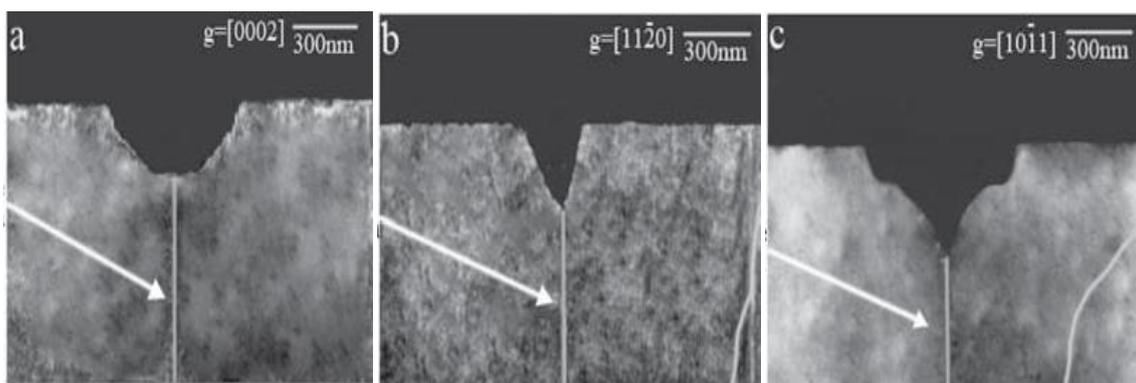


Figure II.13 – [95] Image TEM représentant les trois types de dislocations a) type vis, b) type coin, c) type mixte.

Y.Zhang et al. [96] comparent le fonctionnement de deux cellules solaires basées sur une double hétérojonction InGaN/GaN de type p-i-n avec une forte et une faible densité de dislocations. La figure II.14 présente les images SEM de la surface de deux échantillons

d'InGaN, l'une avec une faible densité de dislocations et l'autre avec une forte densité de dislocations. Des dépressions hexagonales de différentes tailles plus importantes peuvent être observées sur la surface des deux échantillons. La densité totale des dépressions est plus élevée dans l'échantillon de forte densité de dislocations ( $\sim 2 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ) que dans l'échantillon faible densité de dislocation ( $\sim 5 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-2}$ ).

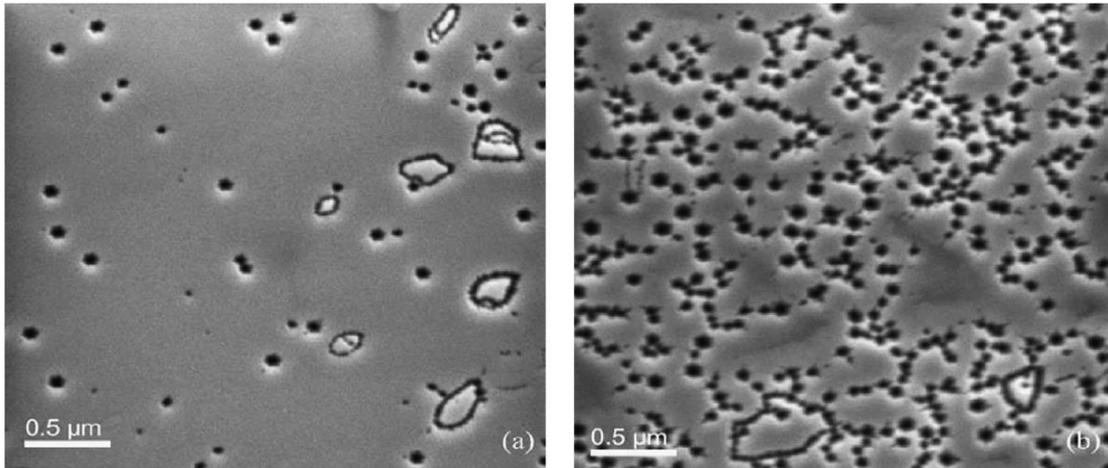


Figure II.14 – Images MEB montrant la morphologie de surface d'échantillons ayant (a) une faible densité de dislocations et (b) une forte densité de dislocations [96].

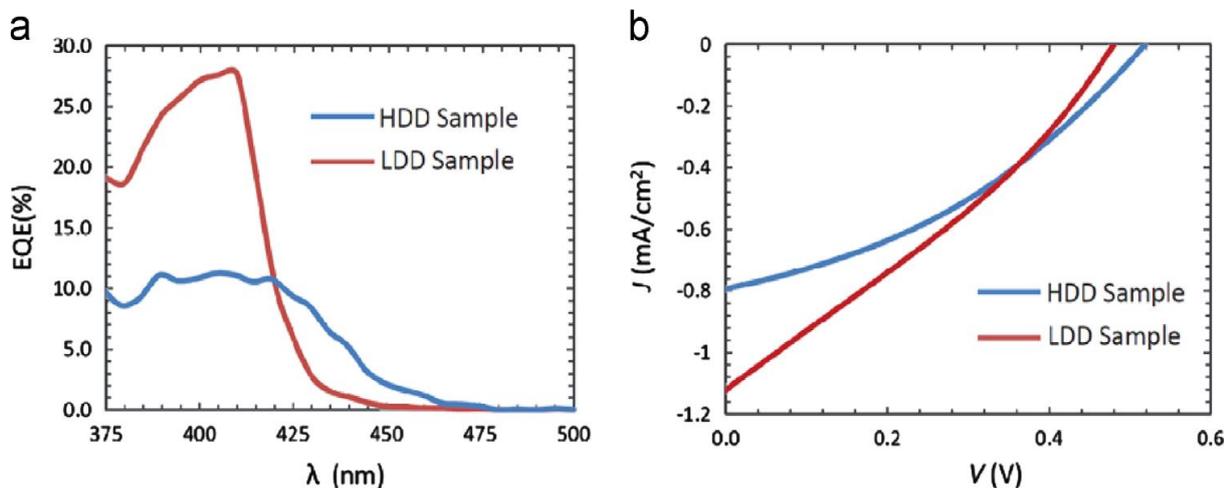


Figure II.15 – (a) la mesure de l'EQE et (b) les courbes J-V mesurées sous une condition d'éclairage de 1.5 AM des structures du dispositif [96].

Les résultats de comparaison réalisée par Y. Zhang et al. [96] montrent que les défauts structuraux du matériau ont un effet significatif sur les performances des cellules. En particulier, une forte densité de puits V s'est formée dans la couche épitaxie d'InGaN qui provient des dislocations à l'interface GaN/saphir. Les défauts V introduisent des dislocations supplémentaires dans la couche p-GaN qui sont préjudiciables aux performances des

dispositifs. Les figures II.15 (a) et (b) montrent que le rendement quantique externe maximal (EQE) de l'échantillon à faible densité de dislocations est trois fois plus élevé que celui de l'échantillon à haute densité de dislocations. La densité de courant de court-circuit  $J_{CC}$  mesurée pour le dispositif avec une faible densité de dislocations,  $1.12 \text{ mA/cm}^2$ , est également plus élevée que celle du dispositif avec une haute densité de dislocations,  $0.79 \text{ mA/cm}^2$ .

## II.7 Dopage dans les nitrures d'éléments III

La jonction PN créée lors de la juxtaposition d'un matériau de type N et d'un matériau de type P, est la base de quasiment tous les dispositifs optoélectroniques dont se trouvent les cellules solaires. Il est donc important d'avoir de bons dopages (type N et P) afin d'obtenir des dispositifs efficaces. Nous avons vu précédemment que les nitrures sont intrinsèquement de type N. De ce fait le dopage N est relativement facile à obtenir, et le dopage P est plus compliqué à réaliser.

Le silicium est le dopant le plus couramment utilisé dans les nitrures pour obtenir un dopage de type N. Sa concentration dans GaN est de l'ordre de  $10^{20} \text{ cm}^{-3}$  [97],[98] il est donc approprié pour le dopage des nitrures, et le dopage N du GaN est actuellement bien maîtrisé. D'autres dopants ont également été étudiés comme l'oxygène [58], l'hydrogène [99] ou le germanium [100].

Le dopage de type P dans les nitrures reste encore difficile à réaliser. En effet ; du fait du caractère intrinsèque de type N des nitrures (InN, GaN et InGaN), il faut dans un premier temps compenser les électrons en excès présents dans le matériau, avant d'arriver à créer un excès de trous. Le magnésium (Mg) est le dopant le plus fréquemment utilisé comme accepteur avec un procédé complexe d'activation à haute température. D'après les résultats expérimentaux, la valeur limite à l'incorporation du Mg de quelques  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$  dans le GaN hexagonal avec une concentration de trous plus faible du fait de la forte énergie d'activation des impuretés Mg [97], [98], [101].

## II.8 Théories sur les cellules solaires à base d'InGaN

Depuis que InGaN a été proposé comme matériau potentiel pour les cellules solaires par Wu et al. [102] en 2003, des progrès significatifs ont été établis alors que de nombreux défis restent à surmonter pour répondre aux exigences du PV au nitrure-III à haute efficacité. Au début, l'alliage InGaN a été uniquement évalué pour des applications photovoltaïques à simple jonction avec des matériaux riches en Ga. Après la révision du gap d'InN, une tentative de fabrication de cellules solaires InGaN est en cours par différents groupes. Nous

allons voir dans cette partie, l'état de l'art des cellules solaires à base d'InGaN ; nous commençons par les structures homo-jonction et hétérojonction qui ont été explorées, et ensuite la structure tandem.

### II.8.1 Cellules solaires homo-jonction à base d'InGaN

Plusieurs groupes ont étudié la structure homo-jonction p-n ou p-i-n des cellules solaires InGaN. Jani et al. (2007) [103] ont démontré la première cellule solaire homo-jonction à base d'InGaN d'épaisseur égale à 300 nm avec une concentration en indium égale à 28%. La cellule donne une tension en circuit ouvert ( $V_{CO}$ ) de 2.1 V, la valeur qui correspond bien à son énergie de gap de 2.5 eV. La structure de la cellule est présentée sur la figure II.16.

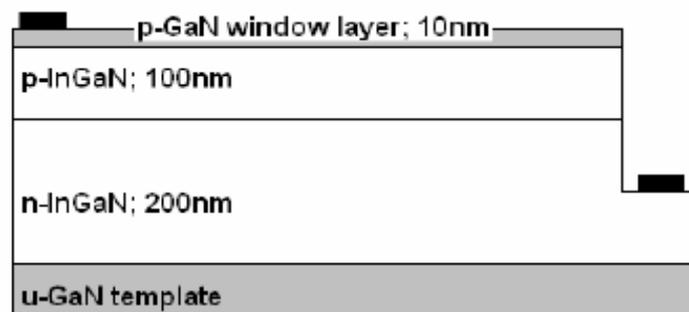


Figure II.16 – Structure de la cellule solaire proposée par Jani et al [103].

Cai et al. [104] ont étudié les caractéristiques courant-tension des cellules à homo-jonction p-InGaN/i-InGaN/n-InGaN en fonction de la concentration d'indium. Les tensions de circuit ouvert ( $V_{CO}$ ) mesurées sont 2.24, 1.34 et 0.96 V, pour  $x = 0.02$ , 0.12 et 0.15, respectivement. Les meilleures performances sont obtenues pour les cellules possédant le moins d'indium, la diminution significative de la tension en circuit ouvert est principalement due à la dégradation de la qualité cristalline lorsque la teneur en indium augmente. Par conséquent, une bonne qualité cristalline est un facteur important pour obtenir une cellule solaire de haute performance à base des nitrures. La figure II.17 présente les caractéristiques électriques de cette cellule solaire.

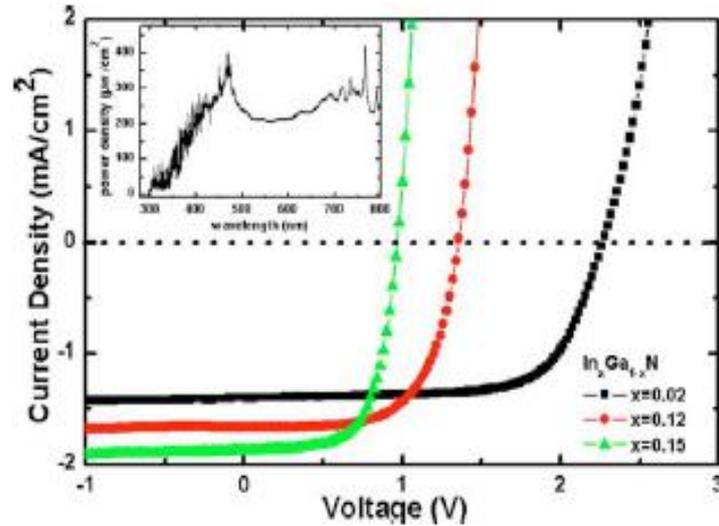


Figure II.17 – Caractéristique I-V de la cellule solaire P-i-N à base d’InGaN en fonction de la concentration d’indium étudiée par Cai et al [104].

Yamamoto et al [105] ont réalisé une cellule solaire p-In<sub>0.25</sub>Ga<sub>0.75</sub>N/n<sup>+</sup>-In<sub>0.25</sub>Ga<sub>0.75</sub>N par la technique MOVPE. Ils ont atteint des valeurs de 1.5 V pour le V<sub>CO</sub> et de 0.5 mA/cm<sup>2</sup> pour le J<sub>CC</sub>, sous un spectre solaire AM1.5G (Figure II.18). La faible J<sub>CC</sub> est attribuée à la large bande interdite (2.57 eV) et à la mauvaise qualité des couches InGaN épaisses (0.5–1 μm). La forte augmentation observée dans le courant direct comparée à celle observée dans l’obscurité indique la nature photoconductrice de la couche p. Les dispositifs ont également souffert de la faible capacité de dopage du p-InGaN, ce qui a entraîné une résistance élevée en série, et par la suite une réduction dans l’efficacité de conversion.

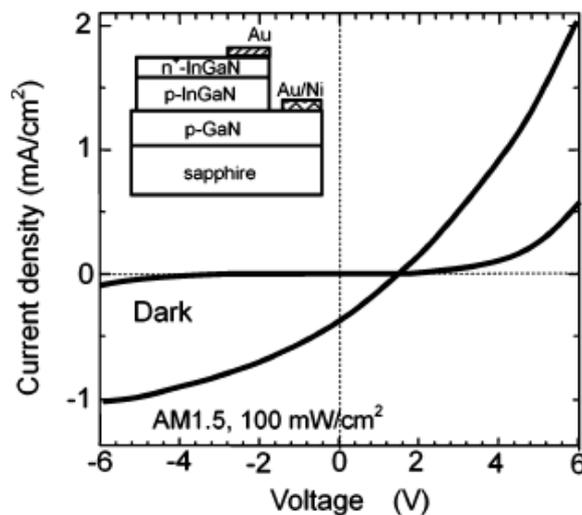


Figure II.18 – Caractéristique J–V d’une jonction n<sup>+</sup>-p d’In<sub>0.25</sub> Ga<sub>0.75</sub> N sous un spectre AM1.5G ; la structure de la cellule est montrée sur le schéma [105].

Une meilleure densité de courant de  $0.91 \text{ mA/cm}^2$  a été obtenue sous un spectre solaire AM0, par Jampana et al. (2010) [106] pour une composition d'indium égale à 15%. La cellule solaire à jonction p-In<sub>0.16</sub>Ga<sub>0.84</sub>N/n-In<sub>0.16</sub>Ga<sub>0.84</sub>N est insérée entre deux couches p-GaN et n-GaN. Le  $V_{CO}$  obtenu est de 1.73 V et le FF est de 61%.

En 2013, Islam et al. [64] ont élaboré une structure homo-jonction In<sub>0.16</sub>Ga<sub>0.84</sub>N de type n+- p sur 0.65  $\mu\text{m}$  de GaN. Sous un éclairnement AM 1.5, ces auteurs ont obtenu une tension en circuit ouvert de 1.4 V et une densité de courant de court-circuit de  $0.25 \text{ mA/cm}^2$ . Pour améliorer les performances et augmenter les photons solaires capturés, le dispositif était ensuite fabriqué sur un substrat de GaN épais avec une incorporation en indium de 25%. Les caractéristiques de cette cellule solaire élaborée par MOVPE présentaient une tension en circuit ouvert de 1.5 V et une densité de courant à court-circuit de  $0.5 \text{ mA/cm}^2$  d'où un rendement de conversion très faible  $\eta < 1\%$ . Les figures II.19 et II.20 présentent la structure de cette cellule solaire et les caractéristiques électriques associées.

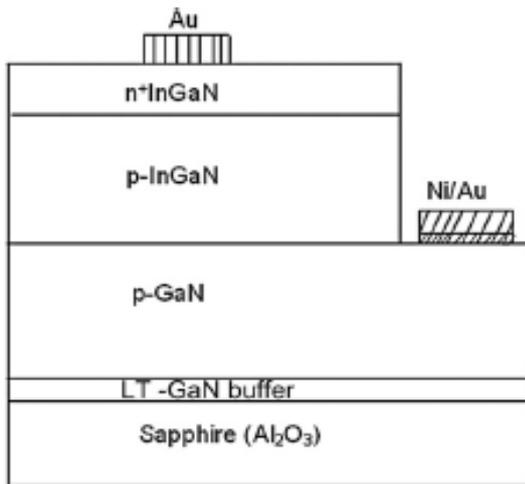


Figure II.19 – Structure de la cellule solaire élaborée par Islam et al [64].

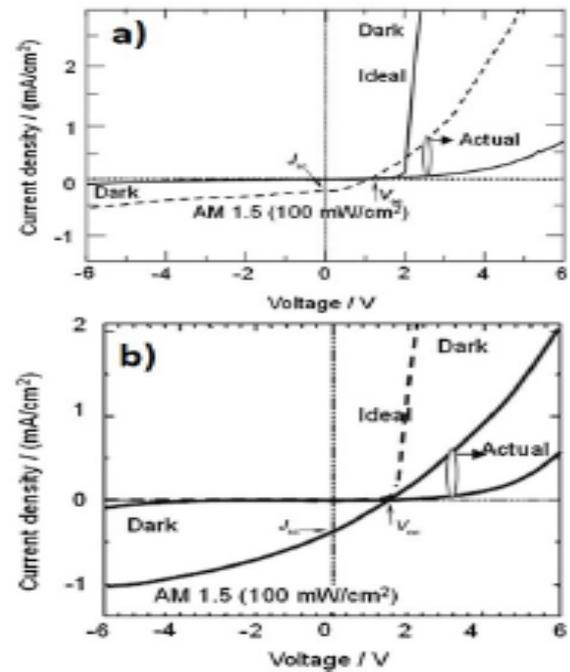


Figure II.20 – Caractéristiques J–V de la structure comprenant une couche active a) In<sub>0.25</sub>Ga<sub>0.75</sub>N et b) In<sub>0.16</sub>Ga<sub>0.84</sub>N [64].

Pour un panorama plus complet, l'état de l'art des cellules solaires homo-jonction basées sur InGaN est présenté dans le tableau II.6. Pour chaque type de structure, nous y reportons les caractéristiques électriques de la cellule ou le rendement obtenu.

Tableau II.6 – Etat de l'art de cellules solaires homo-jonctions à base d'InGaN.

In% /Épaisseur	Performances	Source	Références
18%	$V_{CO} = 0.43 \text{ V}$ , $I_{CC} = 0.04 \text{ mA/cm}^2$	Laser 360 nm	Yang et al. 2007 [107]
0–30% [80/300/800 nm]	$V_{CO} = 2.5 \text{ V}$ , $I_{CC} = 0.04 \text{ mA/cm}^2$	Laser 325 nm	Chen et al. 2008 [108]
2%-10% [50/150/200 nm]	$V_{CO} = 2.24\text{-}0.96 \text{ V}$ , $I_{CC} = 1.4\text{-}1.87 \text{ mA/cm}^2$	Lampe Xenon	Cai et al. 2009 [104]
16%	$V_{CO} = 1.47 \text{ V}$ , $I_{CC} = 0,26 \text{ mA/cm}^2$	AM1.5	Jampana et al. 2010 [106]
14%-33% [100/300 nm]	$V_{CO} = 1.8\text{-}0.02 \text{ V}$ , $I_{CC} = 1\text{-}2.2 \text{ mA/cm}^2$	AM0	Boney et al. 2011[109]
12% - 15%	$\eta = 0.32\text{-}0.26\%$	AM1.5	Cai et al. 2013 [110]
16%	$V_{CO} = 1.4 \text{ V}$ , $I_{CC} = 0.25 \text{ mA/cm}^2$	AM1.5	Islam et al. 2013 [64]

### II.8.2 Cellules solaires hétérojonction à base d'InGaN

Les cellules solaires basées sur les nitrures III de structure hétérojonction, p-GaN/i-InGaN/n-GaN, représentent le type de cellules solaires le plus étudié. Le développement de cellules solaires à couche active épaisse prise en sandwich entre GaN de type p et GaN de type n, a surtout bénéficié de la croissance et de la fabrication à grande échelle de la technologie des DEL InGaN/GaN. Un tableau (II.7) synthétisera à la fin, les données de la littérature des cellules solaires hétérojonction de type p-i-n à base d'InGaN.

Jani et al. [111] ont démontré la première cellule solaire à hétérojonction PIN d'InGaN massif, présentée sur la figure II.21, avec une concentration d'indium de 5 %, ce qui correspond à une bande d'énergie interdite de 3.2 eV. Ils ont obtenu un  $V_{CO}$ , un  $J_{CC}$  et un FF de 2.4 V, 3.7 mA/cm<sup>2</sup> et 78 % respectivement, pour un spectre solaire amplifié dans la gamme UV, la caractéristique courant-tension de la cellule est présentée sur la figure II.22. En outre, le dispositif présente une efficacité quantique interne et externe d'environ 60 % et 43 % respectivement.

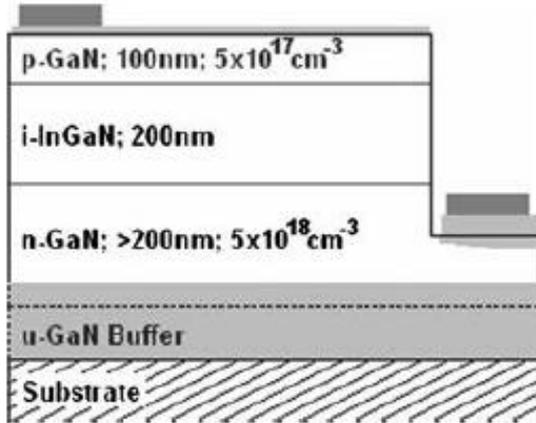


Figure II.21 –Schéma de la cellule solaire p-i-n en double hétérojonction proposée par Jani et al [111].

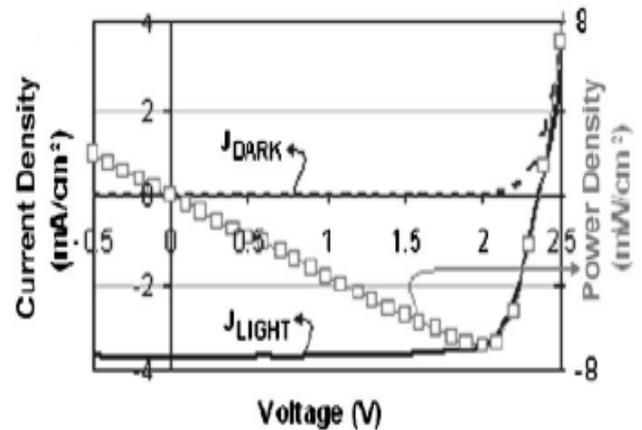


Figure II.22 – Caractéristique courant-tension obtenue par Jani et al. donnant un  $V_{CO}$  de 2.4 V, un  $J_{CC}$  de 3.7 mA/cm<sup>2</sup> et un FF de 78% [111].

Zheng et al. [112] ont ensuite rapporté une amélioration de la même structure (figure II.23) avec une teneur en indium de 10 % qui donne un  $V_{CO}$  égal à 2.1 V et un facteur de forme plus élevé allant jusqu'à 81 % sous un spectre solaire AM1.5. Le dispositif donne une efficacité de conversion de puissance de 0.5 %.

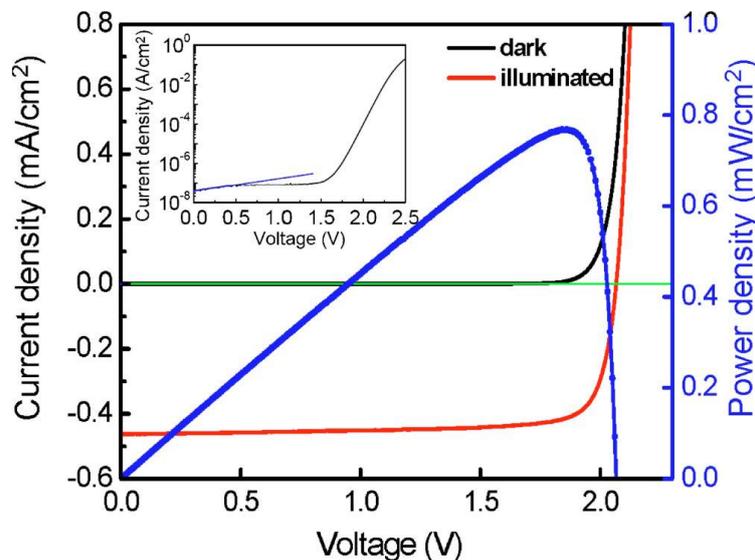


Figure II.23 – Caractéristique I-V d'une cellule solaire p-GaN/iInGaN/n-GaN sous éclairage et dans l'obscurité, ainsi que la caractéristique P -V calculée sous éclairage. Le graphe encadré montre la courbe I -V dans l'obscurité des mêmes cellules photovoltaïques en utilisant une échelle logarithmique [112].

En 2008, Neufeld et al. [113] ont également rapporté des résultats intéressants avec un  $V_{CO}$  de 1.81 V, un  $J_{CC}$  de 4.2 mA/cm<sup>2</sup> et un FF de 0.753, donnant une puissance maximum de

5.7 mW/cm<sup>2</sup> (rendement de 4.4%) sous un spectre AM0. Le schéma de la structure et la caractéristique I (V) associée sont donnés respectivement sur les figures II.24 et II.25.

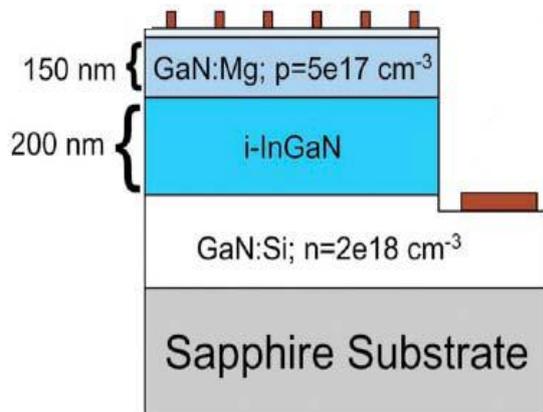


Figure II.24 –Schéma de la cellule solaire pin en double hétérojonction proposée par Neufeld et al. [113].

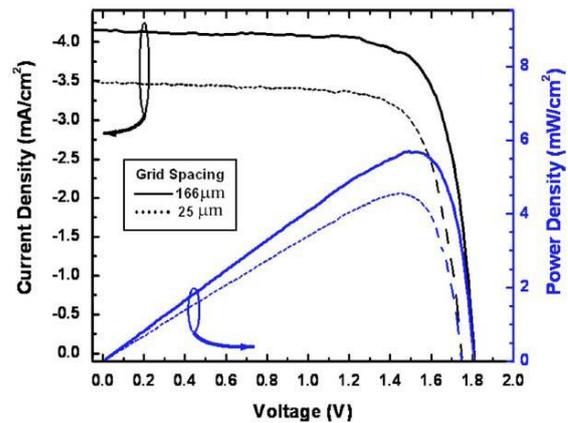


Figure II.25 – Caractéristique courant-tension d'une cellule solaire pin à base d'InGaN/GaN obtenue par Neufeld et al. [113].

Tableau II.7 – Etat de l'art de cellules solaires hétéro-jonctions à base d'InGaN.

In% /Épaisseur	Performances	Source	Références
4% -5% [200 nm]	$V_{CO} = 2.4$ V, $I_{CC} = 3,8$ mA/cm <sup>2</sup>	1Soleil	Jani et al 2007 [111]
10% [150 nm]	$V_{CO} = 2.1$ V, $I_{CC} = 0.46$ mA/cm <sup>2</sup>	AM1.5	Zheng et al 2008 [112]
12% [200 nm]	$V_{CO} = 1.81$ V, $I_{CC} = 4.2$ mA/cm <sup>2</sup>	AM0	Neufeld et al 2008 [113]
10% [150 nm]	$\eta = 0.8\%$ , $V_{CO} = 2.09$ V, $I_{CC} = 0.52$ mA/cm <sup>2</sup>	AM1.5	Horng et al 2009 [114]
12% [60 nm]	$EQE = 72\%$ , $V_{CO} = 1.89$ V, $I_{CC} = 1.06$ mA/cm <sup>2</sup>	1Soleil AM1.5	Matioli et al 2011 [115]
11% [90 nm]	$V_{CO} = 1.75$ V, $I_{CC} = 1.11$ mA/cm <sup>2</sup>	1Solei AM0	Lang et al. 2011 [116]
20% [100 nm]	$\eta=0.06\%$ , $V_{CO} = 2.74$ V, $I_{CC} = 0.21$ mA/cm <sup>2</sup>	AM1.5G	Yao et al 2013 [117]
8% [150nm]	$\eta=1.05\%$ , $I_{CC} = 1.25$ mA/cm <sup>2</sup>	AM1.5	Sang et al 2015 [118]

### II.8.3 Intérêt du matériau InGaN pour les cellules solaires tandem

L'objectif principal de la structure tandem est d'absorber une grande partie du spectre solaire et donc d'augmenter l'efficacité de la cellule en augmentant le courant électrique. L'approche consiste à fabriquer des diodes p-n, p-i-n ou toute autre structure de diode avec des semi-conducteurs à bandes interdites différentes, et à les connecter pour améliorer la conversion PV [119]. La large bande interdite d'InGaN, allant de 0.65 à 3.4 eV, peut couvrir la totalité du spectre solaire. Cela donne à InGaN une grande importance pour les applications photovoltaïques, en particulier lorsqu'il est utilisé dans la fabrication de cellules solaires tandem à jonctions multiples. La figure II.26 montre les performances de sortie prévues pour des cellules tandem à jonctions multiples avec un nombre différent de sous-cellules. D'après les résultats de la figure, on peut voir qu'un rendement de conversion supérieur à 50 % est obtenu sous un éclairement AM1.5 pour une cellule tandem avec plus de 6 sous-cellules. On constate également qu'un  $V_{CO}$  élevé supérieur à 10 V peut être obtenu pour une cellule tandem à 10 jonctions. La figure II.27 montre le diagramme de bande d'une cellule solaire tandem à 10 jonctions en utilisant la technologie InGaN. Chaque sous-cellule a une couche fenêtre, une couche BSF (back surface field) et est reliée par une jonction tunnel. La réalisation de telle cellule nécessite des films en InGaN avec des teneurs en Ga qui varient de zéro à 0.73 [105].

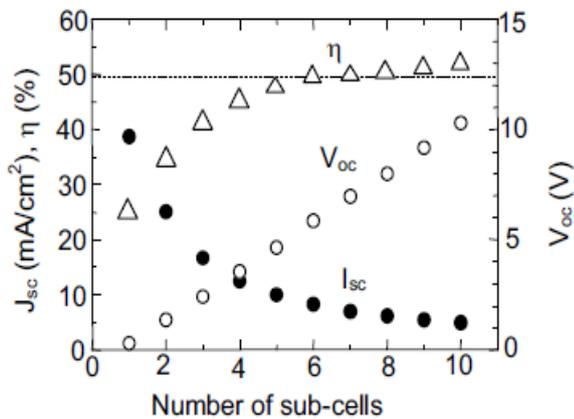


Figure II.26 – Rendement et propriétés électriques de la structure InGaN en fonction du nombre de sous cellules [105].

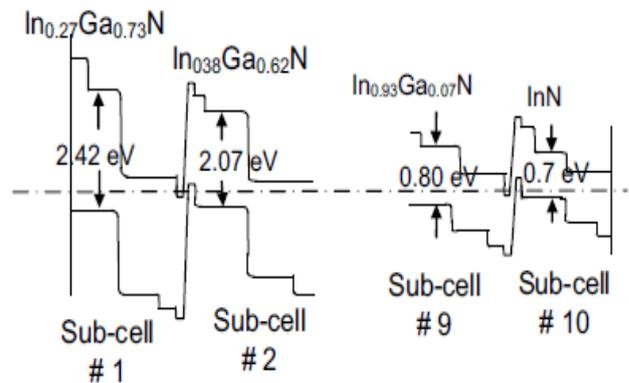


Figure II.27 – Diagramme de bande d'une structure 10 jonctions à base d'InGaN [105].

Différentes structures ont été étudiées sur ce type de cellules. En 2008, Zhang et al. [120] ont simulé une cellule solaire multi-jonction à base d'InGaN ; c'est une structure composée de deux sous cellules de type PN (figure II.28), la première avec une composition d'indium de

0.48 et la seconde avec une composition d'indium de 0.73. Le rendement de conversion obtenu est de 35.1%.

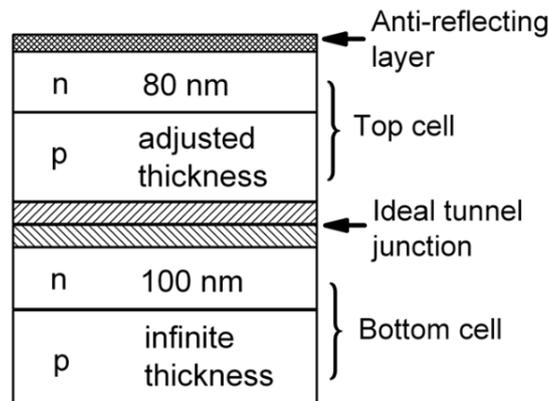


Figure II.28 – Schéma de la cellule solaire à double-jonction simulée par Zhang et al [120].

Hsu et al. [121] ont simulé une structure hétérojonction InGaN/Si. Ils ont montré qu'il est possible d'atteindre un rendement de 31 % avec un gap d'InGaN autour de 1.65 eV et une épaisseur de silicium de 20  $\mu\text{m}$ . La structure est une double jonction : une jonction PN à base d'InGaN connectée en série avec une autre jonction PN à base de silicium. Récemment, M. Lourassi, B. Soudini [122] ont étudié par simulation, l'effet de la polarisation sur une structure tandem à hétérojonction p-GaN/n-In<sub>0.12</sub>Ga<sub>0.88</sub>N/n-In<sub>0.5</sub>Ga<sub>0.5</sub>N/p-Si/n-Si. Les rendements rapportés sont 9.88% sans polarisation et 8.22 % avec polarisation. La figure II.29 représente la structure de la cellule solaire étudiée par M. Lourassi, B. Soudini.

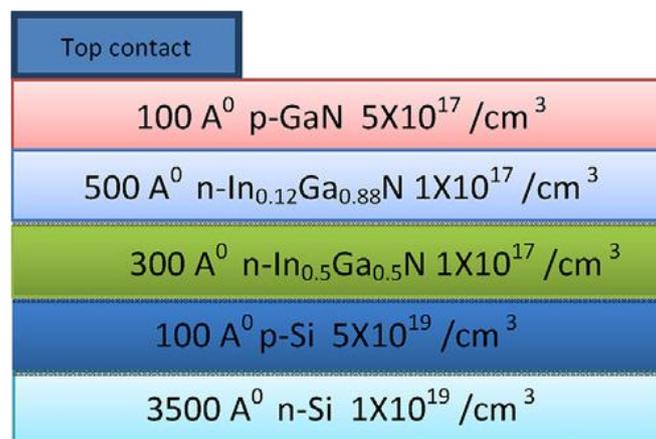


Figure II.29 – Cellule solaire tandem InGaN/Si étudiée par M. Lourassi, B. Soudini [122].

## II.9 Conclusion

Nous avons vu dans ce deuxième chapitre les caractéristiques et les différentes propriétés d'InGaN ; structurel, électronique, etc. Les avantages d'InGaN étaient abordés dans un deuxième temps (un large gap direct qui couvre quasiment tout le spectre solaire) ainsi que

les points faibles de ce matériau (défauts structuraux, concentration élevée d'électrons, croissance difficile, dopage type p difficile). Nous avons également abordé le sujet des substrats possibles pour l'épitaxie d'InGaN. Enfin, une étude bibliographique de l'état de l'art actuel des différentes structures de cellules solaires à base d'InGaN était présentée, à savoir la structure homo-jonction PN ou PIN, la structure hétérojonction PIN et la structure tandem qui est au cœur de ce travail. Nous allons voir par la suite dans le dernier chapitre, une étude consacrée aux simulations menées à l'aide du logiciel ATLAS SILVACO. Nous allons commencer par définir les différents modèles et équations utilisés dans la simulation et aussi le mode de fonctionnement du logiciel utilisé. Après, nous allons présenter les résultats d'optimisation de la structure tandem étudiée dans ce travail.

# III. Modélisation et optimisation d'une cellule solaire tandem à base d'InGaN.

---

<b>III.1 INTRODUCTION</b> .....	<b>58</b>
<b>III.2 MODÉLISATION ET SIMULATION NUMÉRIQUE</b> .....	<b>58</b>
III.2.1 MODÈLE DÉRIVE-DIFFUSION .....	58
III.2.2 MODÉLISATIONS PHYSIQUES .....	59
III.2.3 LOGICIEL DE SIMULATION SILVACO .....	61
<b>III.3 RÉSULTATS DE SIMULATION</b> .....	<b>63</b>
III.3.1 VARIATION DE LA CONCENTRATION D'INDIUM DANS LA SOUS CELLULE.....	65
III.3.2 STRUCTURE ET CARACTÉRISTIQUES DE LA CELLULE SOLAIRE TANDEM .....	66
III.3.3 VARIATION DE L'ÉPAISSEUR ET DU DOPAGE DES COUCHES INTRINSÈQUES .....	69
III.3.4 VARIATION DE L'ÉPAISSEUR ET DU DOPAGE DE LA COUCHE P-GAN .....	70
III.3.5 VARIATION DU DOPAGE P DES COUCHES INGAN .....	71
III.3.6 EFFET DE LA TEMPÉRATURE .....	72
III.3.7 TEXTURATION ET PARAMÈTRES OPTIMALES .....	77
<b>III.4 CONCLUSION</b> .....	<b>80</b>

---

### III.1 Introduction

La bande interdite d'InGaN correspond bien à l'énergie du spectre solaire, cette propriété importante le rend avantageux pour la fabrication des cellules solaires à multi-jonctions de haute performance. Ces cellules solaires se composent de plusieurs jonctions de même matériau et de gaps différents, permettant d'absorber la lumière à partir des courtes longueurs d'onde vers les plus longues [7], [123], [124]. Afin de réduire les cycles d'élaboration et de minimiser les coûts de développement, une simulation numérique des structures de cellules solaires est souvent effectuée. La modélisation et la simulation numérique permettent de prévoir les comportements et les performances des cellules solaires et de visualiser les phénomènes physiques intervenant dans le fonctionnement du composant, tels que les phénomènes de photo génération et la distribution du champ électrique.

Ce troisième chapitre contient deux parties. Dans la première partie nous présentons les modèles physiques et les outils informatiques utilisés pour la simulation et l'optimisation des structures de cellules solaires. La deuxième partie présente les simulations de notre structure de cellule solaire tandem, effectuées à l'aide du logiciel Atlas de SILVACO. Nous étudions l'influence de différents paramètres sur les performances de la cellule photovoltaïque afin d'optimiser ces derniers et par conséquent améliorer le rendement de conversion.

### III.2 Modélisation et simulation numérique

#### III.2.1 Modèle dérive-diffusion

Le logiciel utilisé pour la modélisation de structure de la cellule solaire tandem de notre travail est basée sur le modèle Dérive-Diffusion (en anglais Drift-Diffusion) et la statistique de Fermi Dirac pour décrire la répartition des porteurs de charges dans le matériau. Le modèle dérive-diffusion prend en considération la dérive due au champ électrique appliqué au dispositif et le transport de charges causé par la diffusion des porteurs à travers la structure [125]–[127]. Les équations mises en jeu dans ce modèle sont : l'équation de Poisson, les équations de continuité et les équations de transport.

##### III.2.1.1 Equation de poisson

L'équation de poisson permet de relier le potentiel électrostatique ( $\phi$ ) à la densité volumique des charges électriques. Le champ électrique est obtenu à partir du potentiel électrique par la relation suivante [126], [127] :

$$\vec{E} = -\overrightarrow{grad}\phi \quad (\text{III.1})$$

### III.2.1.2 Equations de continuité

Les équations générales de continuité des électrons et des trous sont données par [126], [127] :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \text{div}\vec{J}_n + G_n - R_n \quad (\text{III.2})$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \text{div}\vec{J}_p + G_p - R_p \quad (\text{III.3})$$

Où  $n$  et  $p$  sont les concentrations des électrons et des trous,  $\vec{J}_n$  et  $\vec{J}_p$  sont les densités de courant d'électrons et de trous,  $G_n$  et  $G_p$  sont les taux de génération des électrons et des trous et  $R_n$  et  $R_p$  sont les taux de recombinaison des électrons et des trous.

### III.2.1.3 Equations de transport

Le déplacement des porteurs de charges se fait par un champ électrique, et on a un courant appelé courant de dérive (ou courant de conduction) proportionnel au champ électrique ; et par diffusion des porteurs des régions à forte concentration vers les régions à faible concentration, c'est le courant de diffusion. La densité de courant totale pour les électrons et les trous est donnée par [126], [127] :

$$\vec{J}_n = n \cdot q \cdot \mu_n \vec{E} + q \cdot D_n \nabla n \quad (\text{III.4})$$

$$\vec{J}_p = p \cdot q \cdot \mu_p \vec{E} - q \cdot D_p \nabla p \quad (\text{III.5})$$

Où  $\vec{E}$  est le champ électrique ;  $\mu_n$  et  $\mu_p$  sont les mobilités respectivement des électrons et des trous et  $D_n$  et  $D_p$  sont les constantes de diffusion des électrons et des trous, données par :

$$D_{n,p} = \frac{k_B T}{q} \mu_{n,p} \quad (\text{III.6})$$

Où  $k_B$  est la constante de Boltzmann et  $T$  la température.

### III.2.2 Modélisations physiques

ATLAS comprend plusieurs dizaines de modèles pour des phénomènes physiques divers. Dans cette section, nous allons aborder seulement quelques modèles.

### III.2.2.1 Modèles de mobilité

Le modèle que nous utilisons est un modèle analytique et empirique proposé par Caughey et Thomas [128] dans lequel sont pris en compte à la fois le champ électrique et la température. La mobilité des électrons  $\mu_n$  et celle des trous  $\mu_p$  est donnée par la relation suivante :

$$\mu_{n,p}(N) = \mu_{min,n,p} + \frac{\mu_{max,n,p} - \mu_{min,n,p}}{1 + (N/N_{g,n,p})^{\gamma_{n,p}}} \quad (III.7)$$

Où  $N$  est la concentration totale du dopage,  $T$  la température,  $\gamma_{n,p}$ ,  $\mu_{min}$ ,  $\mu_{max}$  et  $N_{g,n,p}$  sont des paramètres empiriques. Leurs valeurs sont rapportées dans le tableau III.1.

Tableau III.1 – les paramètres utilisés dans l'équation (III.7) pour modéliser les mobilités des électrons et des trous [129]–[131].

	GaN	InN
$\mu_{min,n}$ (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	55	30
$\mu_{max,n}$ (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	1000	1100
$\gamma_n$	1	1
$N_{g,n}$ (cm <sup>-3</sup> )	2×10 <sup>17</sup>	8×10 <sup>18</sup>
$\mu_{min,p}$ (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	3	3
$\mu_{max,p}$ (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	170	340
$\gamma_p$	2	2
$N_{g,p}$ (cm <sup>-3</sup> )	3×10 <sup>17</sup>	3×10 <sup>17</sup>

### III.2.2.2 Coefficient d'absorption

Le coefficient d'absorption est un paramètre qui influence directement la densité de courant délivrée par la cellule et donc son rendement. Pour décrire l'absorption dans InGaN, nous utilisons un modèle empirique défini par la relation suivante [124] :

$$\alpha^{(cm^{-1})} = 10^5 \sqrt{C(E_{ph} - E_g) + D(E_{ph} - E_g)^2} \quad (III.8)$$

Où  $E_{ph}$  est l'énergie du photon incident et  $E_g$  est l'énergie de la bande interdite pour une composition d'indium donnée. Les valeurs de  $C$  et  $D$ , sont obtenues à partir des mesures expérimentales.

### III.2.2.3 Modèles de génération et recombinaison des porteurs

Pour la modélisation des pertes dans la structure, nous prenons en compte les recombinaisons Shockley-Read-Hall (SRH), la recombinaison radiative et la recombinaison Auger. Les mécanismes de tous ces types de recombinaisons sont traités dans le chapitre 2.

### III.2.3 Logiciel de simulation SILVACO

Le logiciel Atlas appartient aux familles des logiciels de la société SILVACO (Silicon Valley Corporation) ; c'est un logiciel de simulation 2D/3D basé sur la méthode des éléments finis. SILVACO permet la modélisation physique et les processus de fabrication (gravure, dépôt, dopage, épitaxie...) des composants à base de semi-conducteurs, notamment les cellules solaires. Atlas permet de prédire le comportement électrique et fournit aussi des informations sur la distribution interne des variables associées au fonctionnement du dispositif telles que, le champ électrique, le potentiel, les concentrations des porteurs de charges, etc.

#### III.2.3.1 Outils de SILVACO

SILVACO possède deux outils principaux (figure III.1) :

- les outils de cœur contenant l'outil de simulation du dispositif, ATLAS et le simulateur de processus, ATHENA.
- les outils interactifs (DeckBuild, DevEdit et TonyPlot) qui nous permettent de communiquer avec les simulateurs et de visualiser les résultats obtenus. DeckBuild permet d'écrire les commandes à exécuter et de visualiser l'exécution du code en temps réel, DevEdit est un éditeur graphique qui permet d'éditer la structure (dopage, maillage, les types de matériaux) et TonyPlot permet de visualiser les résultats de simulation.

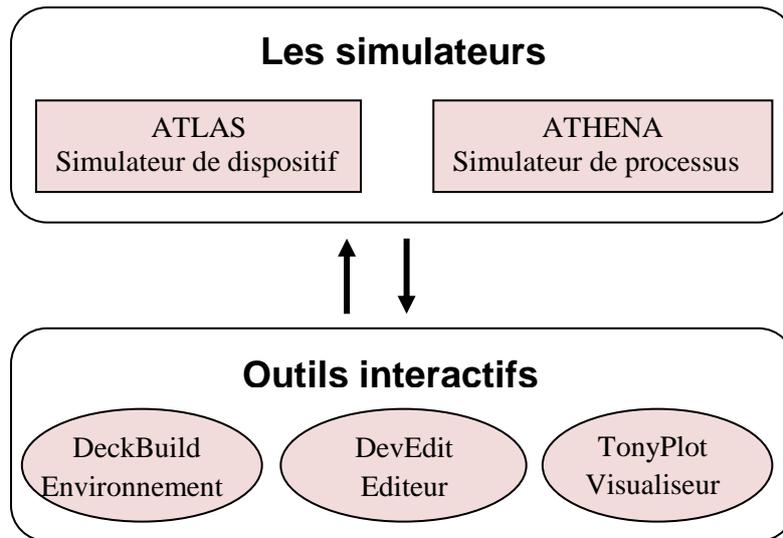


Figure III.1 – Les différents outils de SILVACO.

### III.2.3.2 Mode de fonctionnement

Le programme de simulation d'un dispositif se fait en plusieurs étapes qui sont traitées par les outils de SILVACO définis auparavant (figure III.2) [132].

- 1e. Définition de la structure : cette étape contient la définition du maillage, des différentes régions, du dopage et des électrodes.
- 2e. Définition des modèles et des matériaux : cela comprend la définition des matériaux utilisés, des paramètres d'interface et des modèles physiques utilisés.
- 3e. Définition de la méthode numérique : cette étape indique la méthode numérique à utiliser pour résoudre les équations aux dérivées partielles.
- 4e. Spécification des solutions : par les instructions, LOG, SOLVE et SAVE.
- 5e. Analyse des résultats : par les instructions EXTRACT et TONYPLOT qui permettent d'extraire les valeurs des paramètres enregistrés et d'afficher graphiquement les résultats.

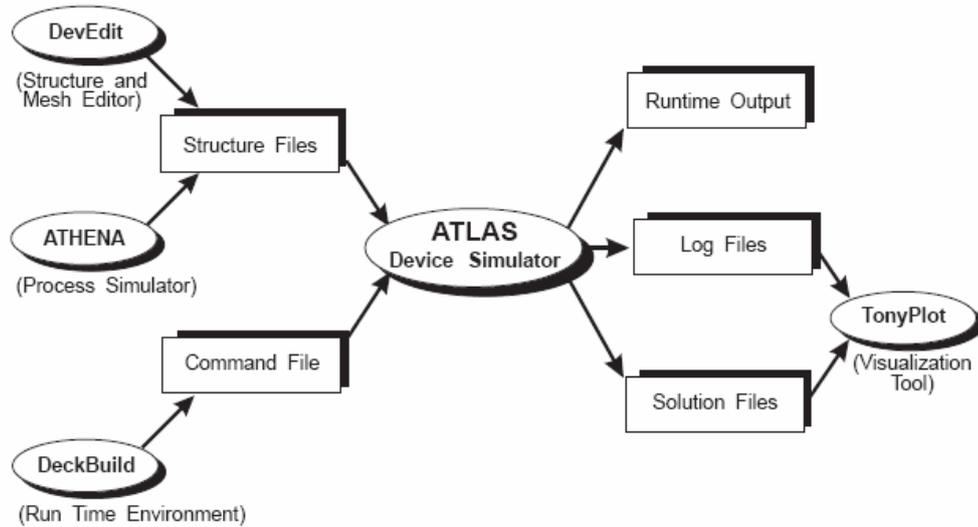


Figure III.2 – Fichiers d’entrée et de sortie d’Atlas [132].

### III.3 Résultats de simulation

La structure modélisée dans ce travail est une structure tandem composée de deux sous cellules à homojonction de type p-i-n basée sur le matériau ternaire InGaN. La structure de la sous cellule est prise de la référence [133]. La figure III.3 présente la structure de la sous cellule étudiée. La couche P-GaN a 15 nm d’épaisseur et un dopage de  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , les couches P-InGaN et N-InGaN ont 90 nm et 150 nm d’épaisseur et des dopages de  $10^{16}$  et  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , respectivement, et la couche intrinsèque d’InGaN a 240 nm d’épaisseur et un dopage de  $10^{14} \text{ cm}^{-3}$ .

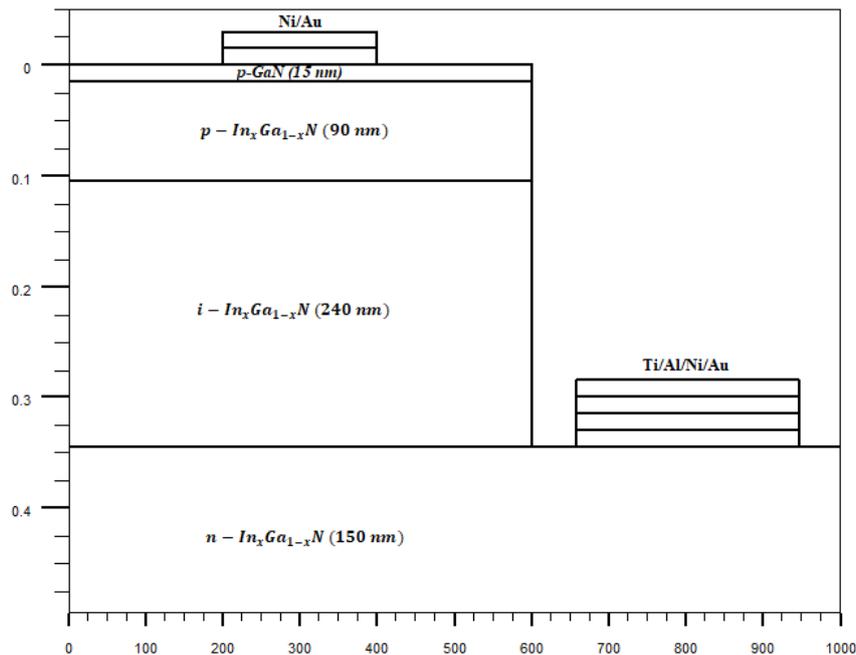


Figure III.3 – Structure de la sous-cellule.

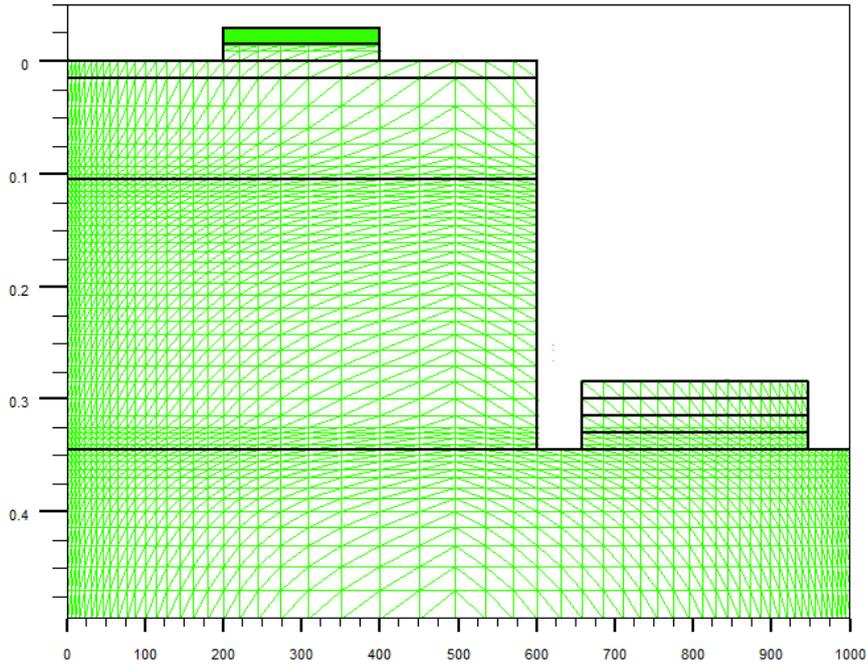


Figure III.4 – Maillage de la sous-cellule.

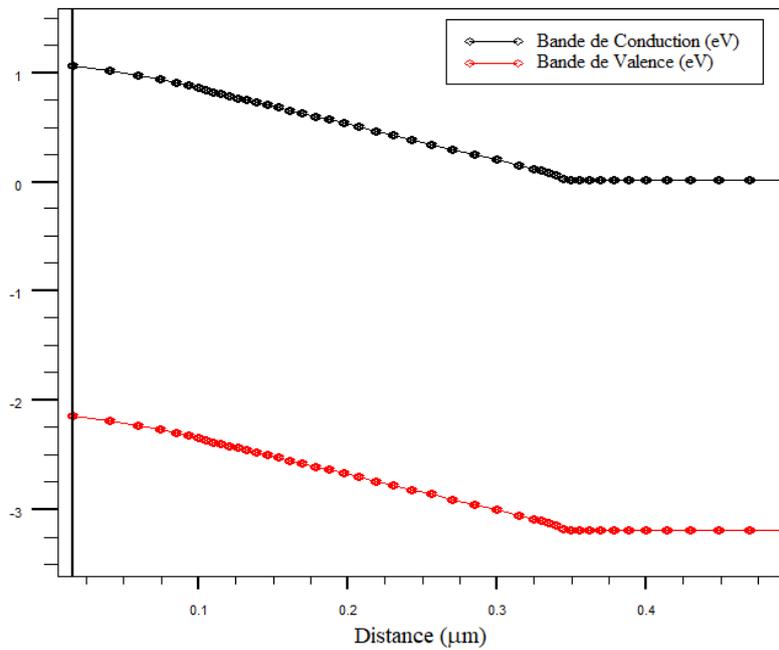


Figure III.5 – Diagramme de bande de la sous-cellule.

Le maillage à travers la structure de la sous cellule est présenté sur la figure III.4. Afin d'obtenir une bonne précision à des temps de calcul raisonnables, nous utilisons un maillage plus dense dans les régions importantes pour la simulation, et large aux autres régions. Le diagramme de bande de la structure est donné par la figure III.5. Les lignes continues noires et rouges indiquent respectivement les énergies de conduction et de valence, aucune

discontinuité de bandes n'est visible dans ce diagramme. La figure III.6 donne la concentration des électrons et des trous à travers la structure de la sous cellule.

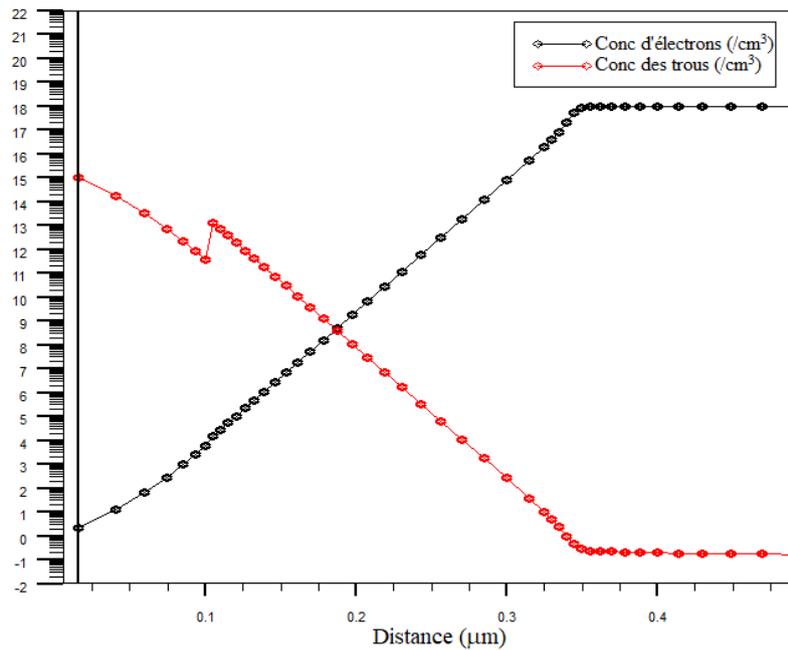


Figure III.6 – Concentration des électrons et des trous à travers la structure de la sous-cellule.

### III.3.1 Variation de la concentration d'indium dans la sous cellule

Les caractéristiques des dispositifs PVs p-i-n/InGaN sont simulées sous spectre solaire AM1.5. Tout d'abord, nous étudions la variation de la densité de courant  $J(V)$  de la sous cellule solaire, pour différents teneurs en indium. Les résultats sont présentés sur la figure III.7. Lorsque la concentration d'indium augmente, le  $V_{CO}$  diminue ; comme déjà expliqué [134], cette réduction due à des courants de fuite élevés, résulte d'une forte concentration (> 20%) d'indium.

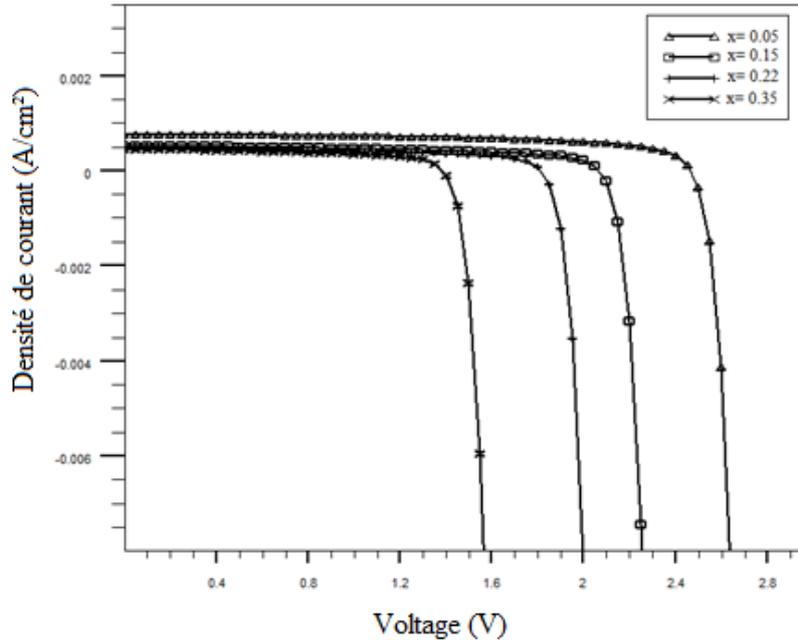


Figure III.7 – La caractéristique J-V de la sous cellule pour différentes concentrations d'indium.

Les résultats obtenus pour une concentration d'indium de 15% sont proches de ceux trouvés expérimentalement par Liwen Sang et al [133]. Le tableau III.2 récapitule les résultats de la simulation.

Tableau III.2 – Résultats de simulation.

	x	$J_{CC}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	$V_{CO}$ (V)	FF (%)	$\eta$ (%)
Nos résultats	0.05	0.77	2.46	64.61	1.22
	<b>0.15</b>	<b>0.52</b>	<b>2.06</b>	<b>57.90</b>	<b>0.62</b>
	0.22	0.50	1.80	56.84	0.52
	0.35	0.50	1.37	59.31	0.41
Liwen Sang et al. <sup>12</sup>	<b>0.15</b>	<b>0.77</b>	<b>1.31</b>	<b>55</b>	<b>0.55</b>

### III.3.2 Structure et caractéristiques de la cellule solaire tandem

La figure III.8 présente la structure de la cellule solaire tandem à base d'InGaN étudiée dans ce travail ; elle est formée de deux sous-cellules p-i-n/InGaN. Les deux sous-cellules sont séparées par une jonction tunnel p-InGaN/n-InGaN.

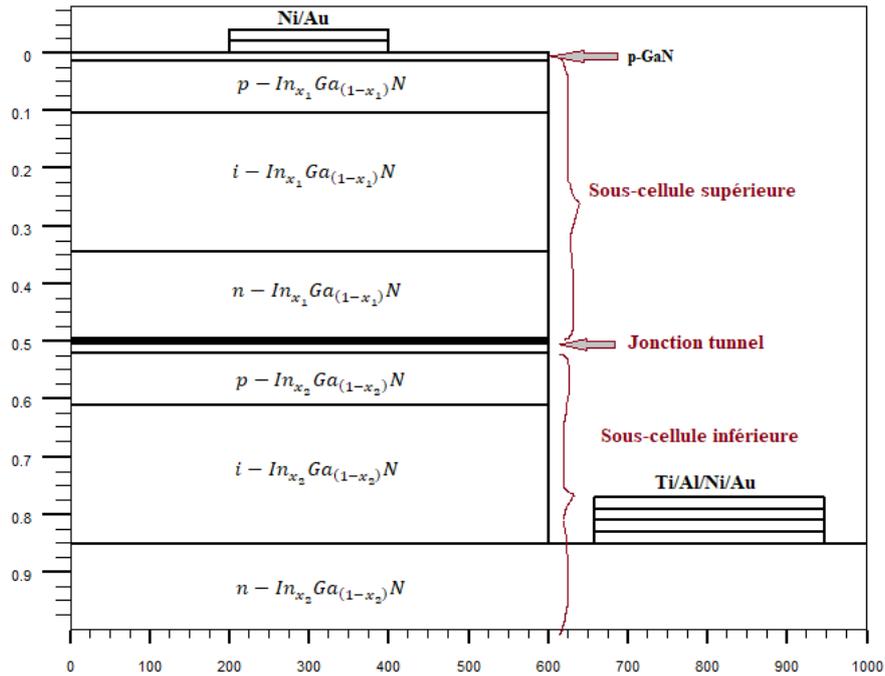


Figure III.8 – Structure de la cellule tandem.

Nous commençons par étudier toutes les cellules tandem possibles avec des concentrations d'indium de 0.05, 0.15, 0.22 et 0.35. Le tableau III.3 donne le détail des différentes cellules solaires simulées.

Tableau III.3 – Cellules tandem simulées.

Numéro de la cellule simulée	Fraction d'indium ( $x_1$ )	Fraction d'indium ( $x_2$ )
Cell#1	0.05	0.15
Cell#2	0.05	0.22
Cell#3	0.05	0.35
Cell#4	0.15	0.22
Cell#5	0.15	0.35
Cell#6	0.22	0.35

La figure III.9 résume les résultats obtenus pour la densité de courant de court-circuit, la tension de circuit ouvert et le rendement. La cellule solaire tandem de concentration d'indium de 0.05 et 0.15 pour la sous-cellule supérieure et la sous-cellule inférieure respectivement, donne de meilleurs résultats ; nous choisissons alors ce cas de figure pour continuer notre étude.

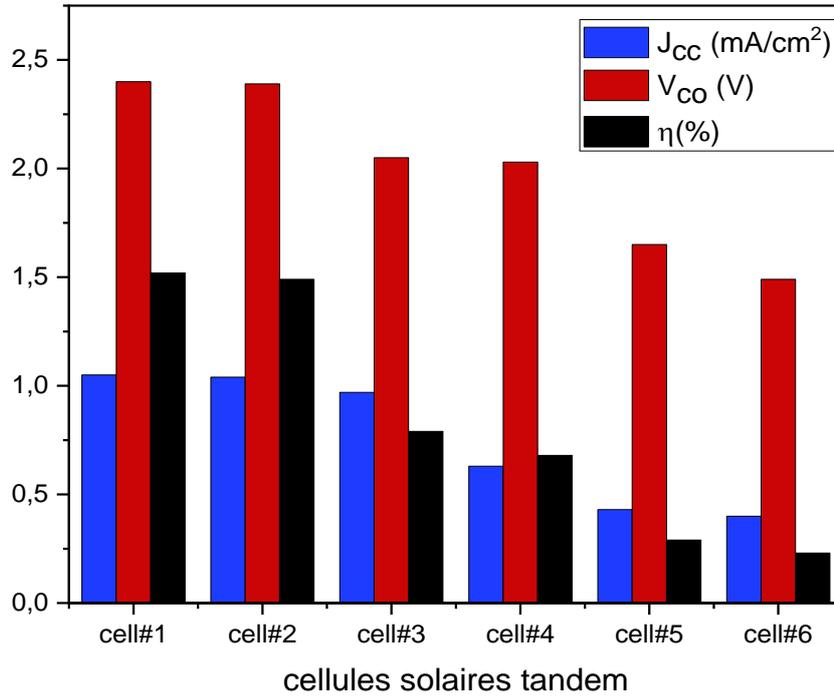


Figure III.9 – Densité de courant de court circuit, tension de circuit ouvert et rendement de conversion des différentes cellules solaires simulées.

La figure III.10 représente la caractéristique J-V de la cellule tandem, la sous cellule supérieure et la sous cellule inférieure. Comme le montre la figure,  $J_{CC}$  de la cellule tandem est supérieur à  $J_{CC}$  des deux sous-cellules ; la tension  $V_{CO}$  de la cellule tandem est presque égale à la tension  $V_{CO}$  de la cellule supérieure ; pour la cellule tandem, nous obtenons une densité de courant de court-circuit de 1.05 mA/cm<sup>2</sup> et une tension de circuit ouvert de 2.46 V ; tous les résultats sont présentés dans le tableau III.4.

Tableau III.4 –Résultats de simulation.

	$J_{cc}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	$V_{co}$ (V)	$\eta$ (%)
Sous cellule supérieure	0.77	2.46	1.22
Sous cellule inférieure	0.52	2.06	0.62
Cellule tandem	1.05	2.46	1.52

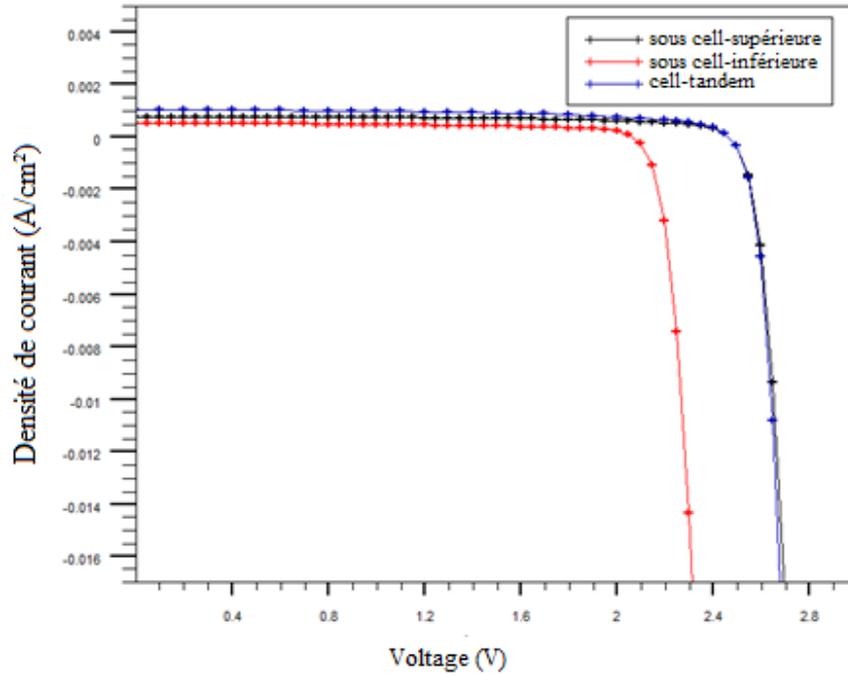


Figure III.10 – La caractéristique J-V de la cellule tandem, la sous cellule supérieure et la sous cellule inférieure.

Notre objectif est de réaliser une optimisation qui donne des performances optimales de la cellule modélisée. Pour ce faire, nous jouons sur plusieurs paramètres physiques et géométriques de la cellule tels que le dopage, les épaisseurs des couches, la température, etc.

### III.3.3 Variation de l'épaisseur et du dopage des couches intrinsèques

La première étude que nous menons est l'effet de l'épaisseur et de la concentration électronique intrinsèque ( $d_i$  et  $N_i$ ). Comme nous avons expliqué dans le chapitre 2, les alliages InGaN sont intrinsèquement de type n à cause des défauts de lacune d'azote qui sont les plus probables. La concentration électronique intrinsèque dans ces alliages peut atteindre des niveaux supérieurs à  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Dans nos simulations, nous faisons varier cette concentration électronique de  $10^{14}$  à  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , pour différentes épaisseurs de la couche intrinsèque.

Comme le montre la figure III.11 ; pour de faibles épaisseurs des couches intrinsèques dans les deux sous-cellules de la cellule solaire tandem, le dopage intrinsèque n'a pas d'effet ou un léger effet sur les caractéristiques de la cellule à savoir, la densité de courant de court circuit, la tension en circuit ouvert et le rendement de conversion. Par contre pour des épaisseurs plus élevées, le dopage intrinsèque influe fortement sur ces caractéristiques. En augmentant la concentration électronique intrinsèque (CEI), la densité de courant de court circuit et le rendement de conversion commencent à diminuer, ceci est dû à la diminution de la ZCE en augmentant la CEI, ce qui favorise la recombinaison dans les couches intrinsèques.

Nous observons aussi que lorsque le dopage des couches intrinsèques est supérieur à celui des couches dopées P, le rendement chute brutalement. Ceci est expliqué par le fait que la zone de charge d'espace se déplace dans la couche P limitant la séparation des charges et la collecte des porteurs.

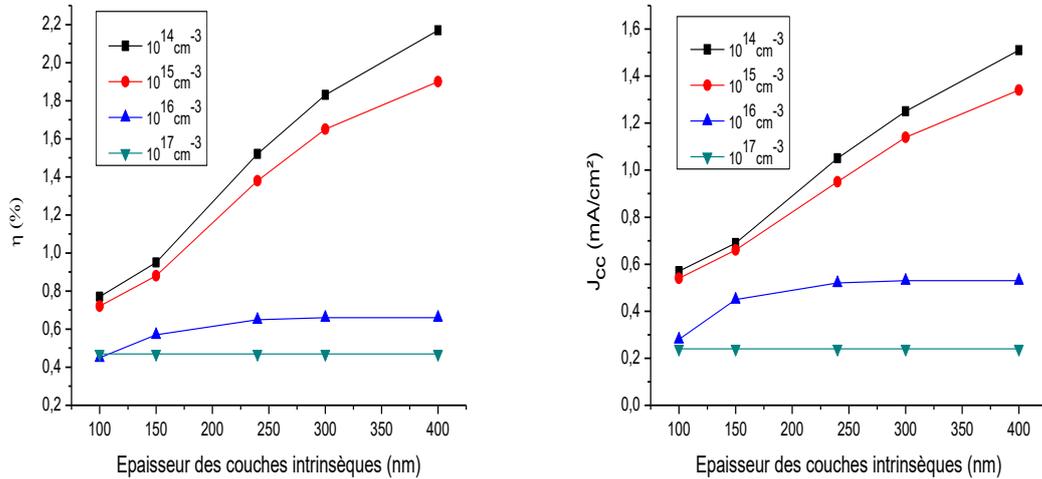


Figure III.11 – Variation du rendement de la cellule (droite) et de la densité de courant en fonction de l'épaisseur des couches intrinsèques pour différents dopages.

### III.3.4 Variation de l'épaisseur et du dopage de la couche p-GaN

Comme une deuxième étude, nous simulons l'effet de l'épaisseur et du dopage ( $d_p$  et  $N_a$ ) de la couche p-GaN sur les caractéristiques de la cellule solaire tandem (figure III.12). Lorsque le dopage type p de la couche InGaN augmente, la qualité de cette dernière se dégrade ce qui nécessite la croissance d'une couche fine de p-GaN au sommet pour obtenir un contact ohmique de haute qualité [118]. Une épaisseur de 40 nm pour la couche p-GaN nous donne un meilleur résultat de rendement de conversion avec une valeur égale à 3.72 %. Au delà de 40 nm, la tension de circuit ouvert et le rendement de conversion diminuent légèrement. En augmentant le dopage de la couche p-GaN de la sous-cellule supérieure, la ZCE devient très mince, les porteurs peuvent enrichir la barrière, et par conséquent les caractéristiques de la cellule solaire tandem s'améliorent ; nous obtenons un rendement de conversion optimal égal à 3.79 % pour un dopage p de la couche GaN de la sous cellule supérieure égal à  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ .

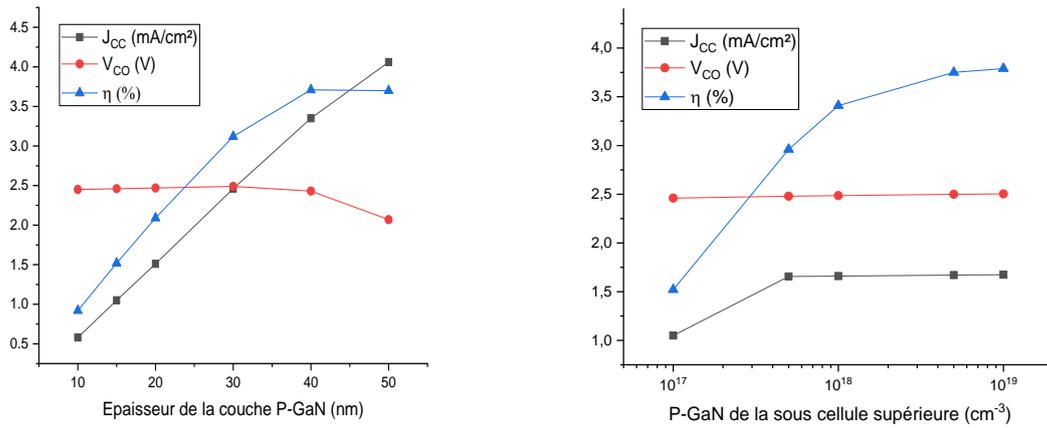


Figure III.12 – Variation des paramètres de la cellule en fonction de l'épaisseur de la couche p-GaN (à gauche), et du dopage de la couche p-GaN (à droite).

### III.3.5 Variation du dopage P des couches InGaN

Comme nous l'avons déjà indiqué, l'élaboration d'une couche InGaN de type P avec une qualité cristalline satisfaisante, reste toujours difficile à réaliser. C'est l'un des défis majeurs pour la réalisation de structures de cellules solaires à base d'InGaN. Dans cette partie, nous allons étudier l'impact du dopage de la couche p-InGaN ( $N_a$ ) sur les caractéristiques de notre structure tandem. La figure III.13 montre les résultats obtenus pour la densité de courant de court circuit, la tension en circuit ouvert, et le rendement de conversion pour des dopages de la couche p-InGaN de la sous cellule supérieure qui varient entre 10<sup>16</sup> et 10<sup>18</sup> cm<sup>-3</sup>. Pour la sous cellule inférieure nous prenons deux valeurs de dopage de la couche p-InGaN, 10<sup>16</sup> et de 10<sup>17</sup> cm<sup>-3</sup>. L'efficacité de la cellule atteint une valeur maximale de 3.58 % pour un dopage p de la sous cellule supérieure égal à 5 × 10<sup>17</sup> cm<sup>-3</sup>. La densité de courant de court circuit ( $J_{SC}$ ) augmente avec le dopage p ; cette augmentation est significative lorsque le dopage de la couche p de la sous cellule supérieure passe de 10<sup>16</sup> cm<sup>-3</sup> à 5 × 10<sup>16</sup> cm<sup>-3</sup>. Quand le dopage p dépasse 5 × 10<sup>16</sup> cm<sup>-3</sup>, le  $J_{SC}$  diminue légèrement. Une valeur maximale de  $V_{CO}$  est obtenue pour un dopage p de 10<sup>18</sup> cm<sup>-3</sup>. Des meilleurs résultats sont obtenus pour un dopage p de la sous cellule inférieure égal à 10<sup>16</sup> cm<sup>-3</sup>.

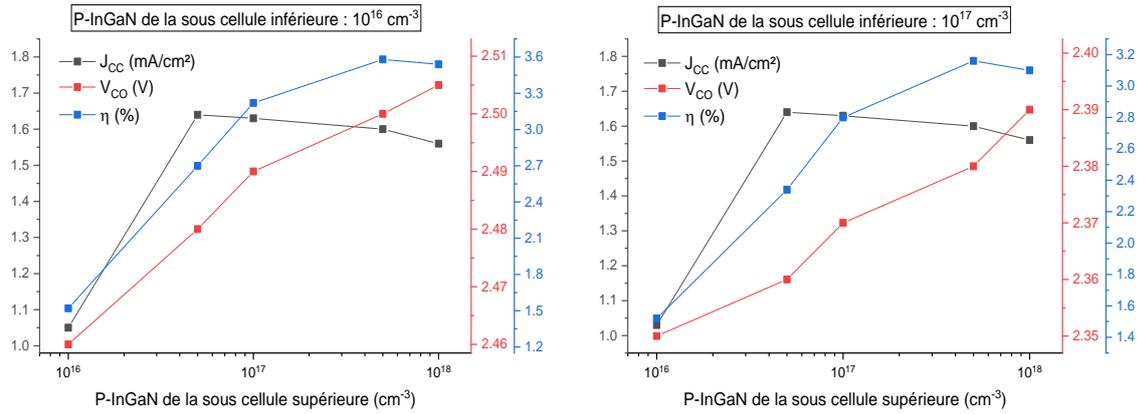


Figure III.13 – Variation des paramètres de la cellule en fonction du dopage de la sous cellule supérieure p-InGaN.

Nous venons d'étudier l'effet des deux paramètres ; l'épaisseur et le dopage des différentes couches sur la performance de la cellule solaire modélisée, les valeurs optimales obtenues pour ces deux paramètres sont résumées dans le tableau III.5.

Tableau III.5 – Paramètres optimisée de la cellule tandem modélisée.

Couches	Sous cellule supérieure			Sous cellule inférieure		
	p-GaN	p-InGaN	i-InGaN	p-GaN	p-InGaN	i-InGaN
Epaisseur (nm)	30	90	400	30	90	400
Dopage (cm <sup>-3</sup> )	10 <sup>19</sup>	5 × 10 <sup>17</sup>	10 <sup>14</sup>	10 <sup>17</sup>	10 <sup>16</sup>	10 <sup>14</sup>

Dans la partie suivante, nous allons étudier l'influence de la température sur les caractéristiques de la cellule solaire modélisée ainsi que l'effet de la croissance d'une couche antireflet sur la face avant de la cellule. Pour ce faire, nous prenons la cellule obtenue avec les paramètres optimaux de dopage et de l'épaisseur.

### III.3.6 Effet de la température

Selon la relation de Varshni (eq.III.9), l'énergie de la bande interdite interdite est inversement proportionnelle à la température [38].

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (\text{III.9})$$

$E_g(0)$  est le gap du matériau à 0 K [eV],  $\alpha$  est une constante empirique [eV.K<sup>-1</sup>], et  $\beta$  est une constante associée à la température de Debye [K]. Ces paramètres pour GaN et InN sont rassemblés dans le tableau III.6.

Tableau III.6 –  $E_g$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$  pour GaN et InN [38], [66].

	GaN	InN
$E_g(eV)$ à $T = 0 K$	3.51	0.69
$\alpha$ ( eV.K <sup>-1</sup> )	$9.09 \times 10^{-4}$	$4.1 \times 10^{-4}$
$\beta$ (K)	830	454

Afin d'étudier la dépendance en température de la bande interdite, nous présentons à la figure III.14 le diagramme de la bande interdite de la cellule solaire à modéliser en fonction de la distance le long de la direction de croissance sur une plage de température qui varie de 200 à 500 K. Le tableau III.7 donne les valeurs des gaps de GaN, InN, et  $In_xGa_{1-x}N$  (pour  $x = 0.05, 0.1, 0.15$ ) calculés par la relation de Varshni (eq.III.9).

 Tableau III.7 – Gaps de GaN, InN, et  $In_xGa_{1-x}N$  à différentes températures.

$T(K)$	$E_{gGaN}(eV)$	$E_{gInN}(eV)$	$E_{gIn_{0.05}Ga_{0.95}N}(eV)$	$E_{gIn_{0.1}Ga_{0.9}N}(eV)$	$E_{gIn_{0.15}Ga_{0.85}N}(eV)$
200	3.47	0.66	3.26	3.06	2.86
300	3.437	0.64	3.23	3.028	2.83
400	3.39	0.61	3.18	2.98	2.79
500	3.34	0.58	3.13	2.935	2.74

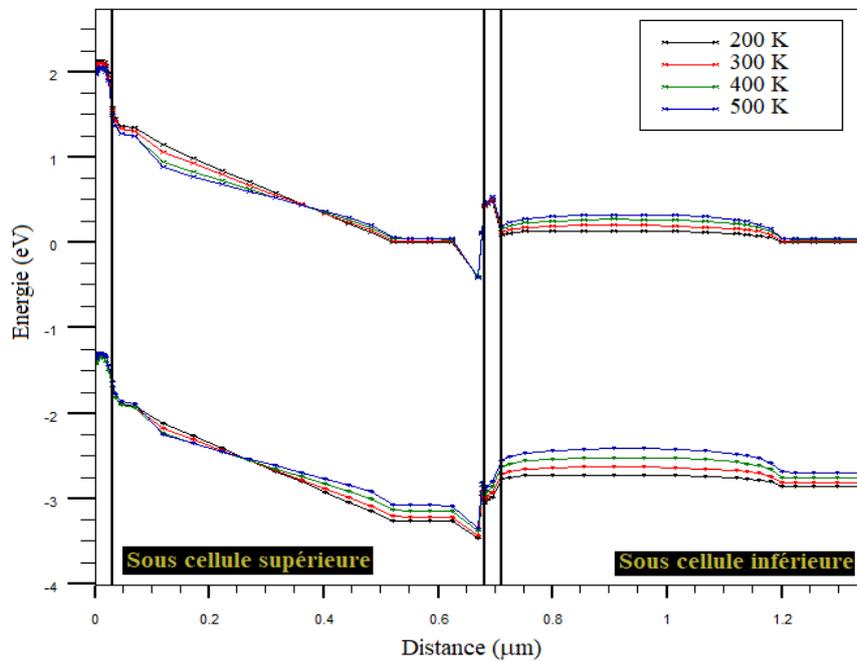


Figure III.14 – Variation de l'énergie de la bande interdite de la cellule tandem en fonction de la température.

Pour les couches p-InGaN des deux sous-cellules, les bandes de conduction et de valence se déplacent vers des énergies plus élevées à mesure que la température augmente. Pour les couches n-InGaN des deux sous-cellules, la partie supérieure de la bande de valence se déplace vers le haut, ce qui entraîne un rétrécissement de la bande interdite. À l'interface p-GaN/p-InGaN, nous observons la formation de puits de potentiel, ce qui s'explique par la modification importante du champ électrique interne et de la recombinaison radiative avec la température (figures III.15 et III.16) qui limitent le transport des paires électron-trou photo-générées à travers les couches épitaxiées. Dans la jonction tunnel p-InGaN/n-InGaN, la formation de puits de potentiel est due au fort dopage dans cette zone.

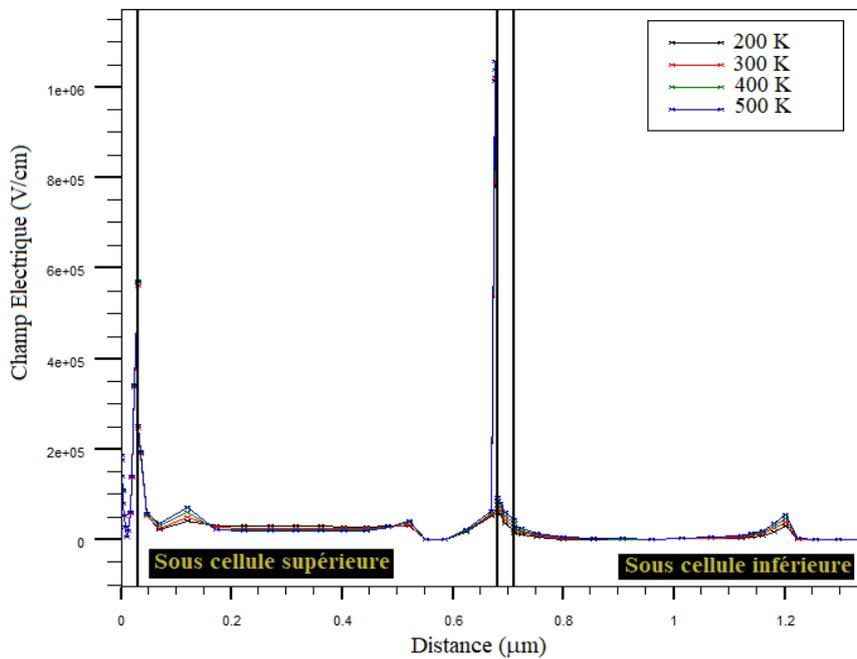


Figure III.15 – Champ électrique à travers la structure pour différentes valeurs de température.

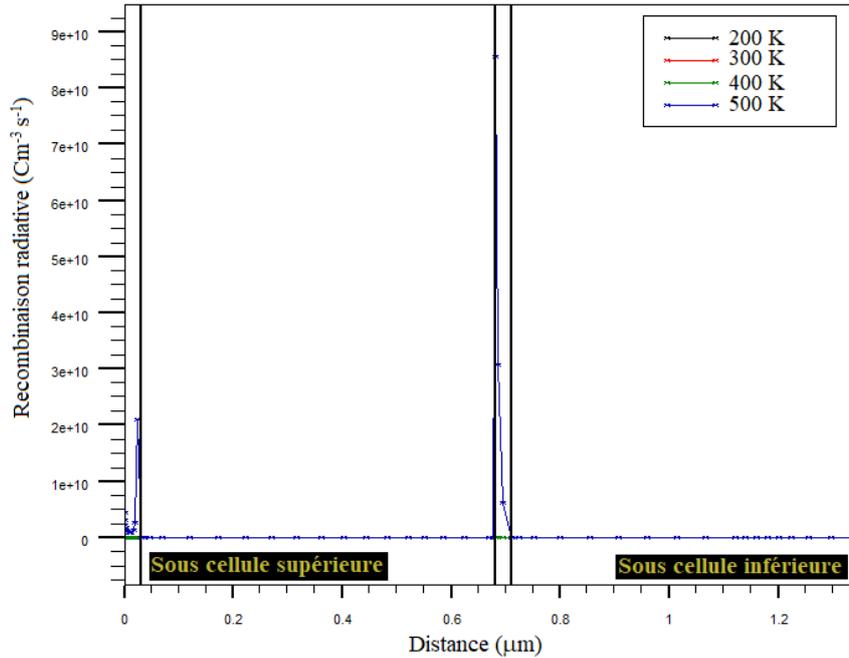


Figure III.16 – Variation du taux de recombinaison radiative à travers la structure pour différentes valeurs de température.

La figure III.17 montre l'existence d'une recombinaison SRH dans la couche i-InGaN de la sous-cellule supérieure, qui varie considérablement avec la température ; cela peut s'expliquer par l'augmentation des défauts structurels.

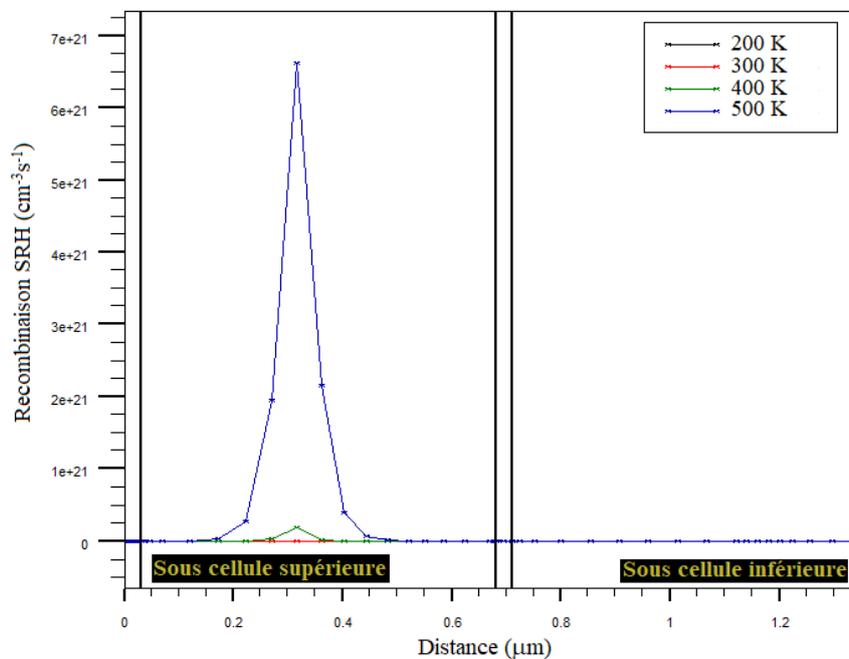


Figure III.17 – Variation du taux de recombinaison SRH à travers la structure pour différentes valeurs de température.

L'effet de la température sur les paramètres de la cellule solaire modélisée est également étudié. Les figures III.18 et III.19 présentent les caractéristiques J-V et P-V de la cellule optimisée sous différentes valeurs de la température. Les résultats montrent bien qu'il y a une augmentation du courant de court-circuit et une diminution de la tension de circuit ouvert avec la température qui peut s'expliquer par le rétrécissement de la bande interdite.

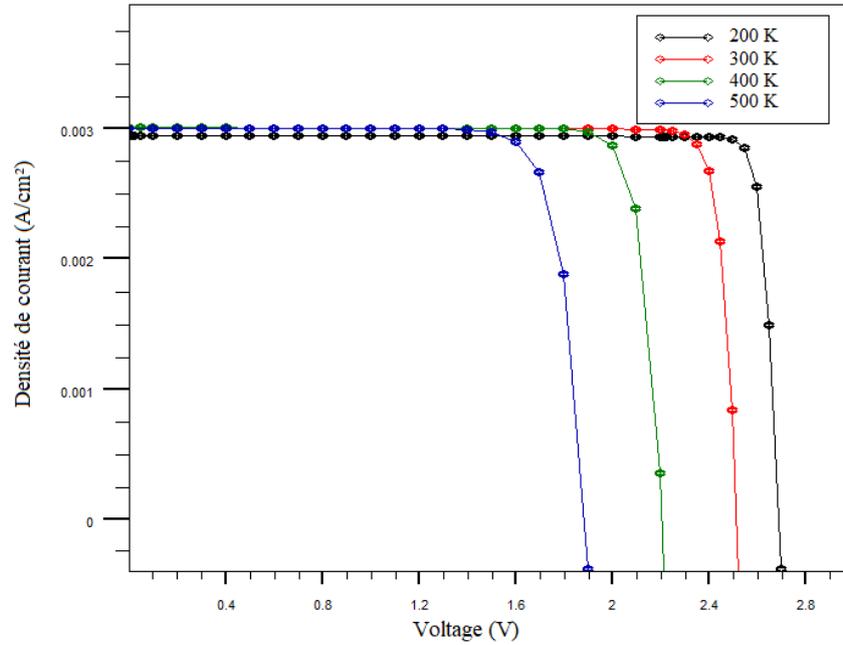


Figure III.18 – Caractéristique J-V pour différentes valeurs de température.

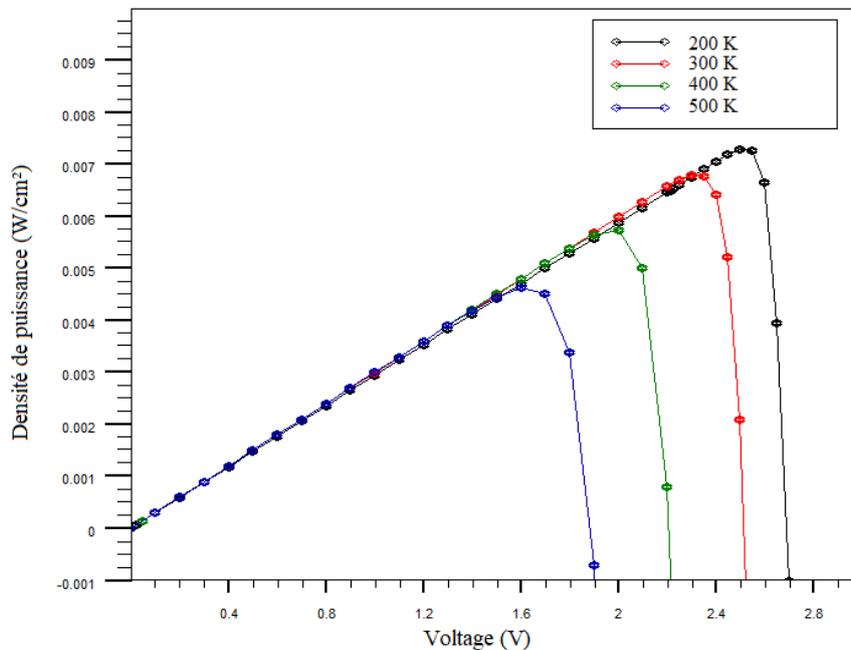


Figure III.19 – Caractéristique P-V pour différentes valeurs de température.

La recombinaison des porteurs photo-générés devient très probable lorsque la température augmente. Ainsi, la diminution de la tension étant plus importante que l'augmentation du courant (les résultats qui se présentent sur la figure III.20), ce qui entraîne une dégradation du rendement des cellules solaires avec la température [135], [136]. Le facteur de forme diminue avec l'augmentation de la température, cela peut s'expliquer par le fait que le FF est une fonction de  $V_{CO}$ . Outre cela, il existe d'autres paramètres qui peuvent affecter le FF tels que la recombinaison, la résistance parasite, le niveau de dopage, etc.

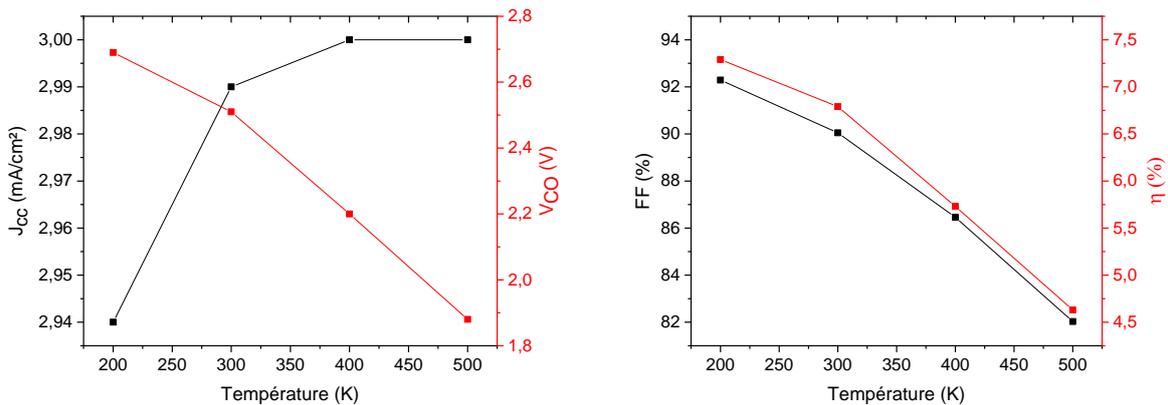


Figure III.20 – Variations des paramètres de la cellule tandem en fonction de la température.

### III.3.7 Texturation et paramètres optimaux

Dans la conception des systèmes photovoltaïques ; la transmission de la lumière, la recombinaison, ainsi que les résistances shunt et série jouent un rôle très important dans l'amélioration des caractéristiques électriques. De nombreuses méthodes ont été proposées pour améliorer les performances, notamment la réduction de la réflexion de la surface des PVs. À cette fin, une couche antireflet (CAR) ou des couches antireflets multiples faites de divers matériaux ont été développées pour minimiser la réflexion du spectre [137].

La dernière partie est consacrée à l'étude de l'effet de la couche antireflet sur les performances de la cellule modélisée et optimisée dans la partie précédente, à 200 K. La couche antireflet déposée sur la face avant de la cellule est le dioxyde de silicium ( $SiO_2$ ) d'épaisseur égale à 40 nm. Les résultats de simulation montrent une amélioration dans les performances de la cellule. Nous obtenons un courant de court circuit égal à 3.39 mA/cm² pour la cellule avec CAR (figure III.21), la densité de puissance maximale est aussi améliorée (figure III.22), d'où l'augmentation du rendement de conversion.

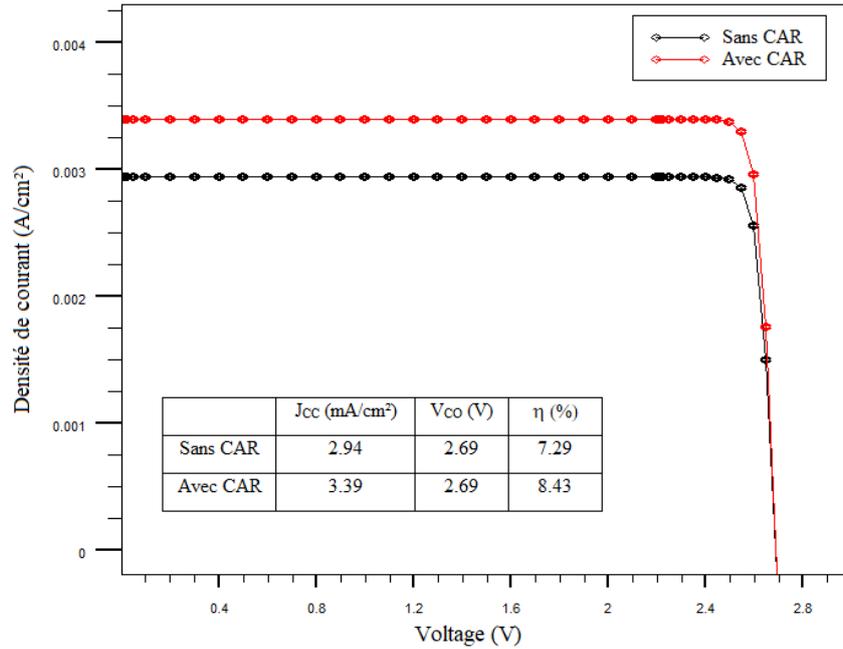


Figure III.21 – Caractéristique J-V de la cellule tandem avec et sans couche antireflet.

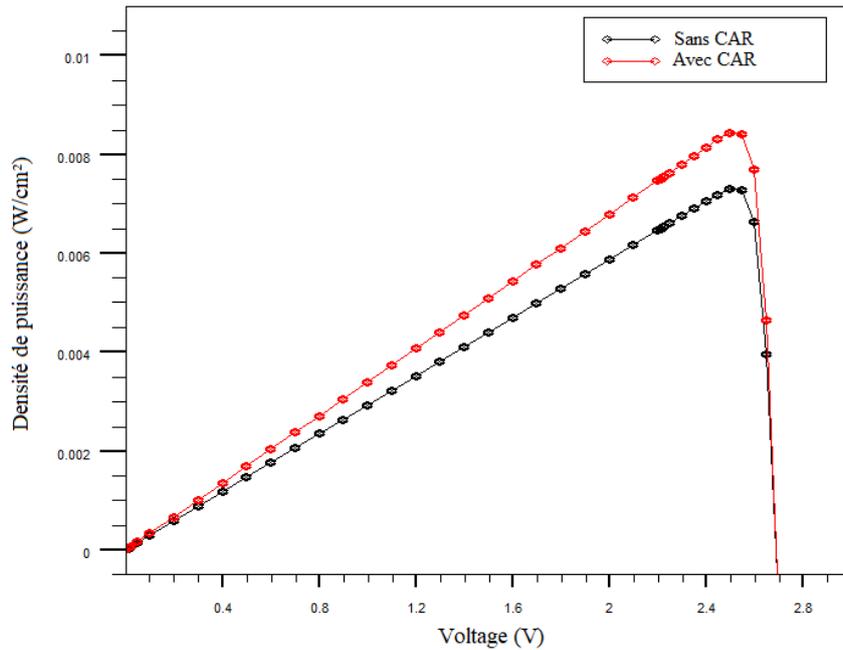


Figure III.22 – Caractéristique P-V de la cellule tandem avec et sans couche antireflet.

L'efficacité quantique externe (EQE) pour la cellule solaire tandem modélisée est ainsi simulée ; la figure III.23 montre les résultats obtenus. Nous atteignons une efficacité quantique externe maximum d'environ 19.5% à une longueur d'onde égale à 300 nm pour la cellule avec CAR ; alors que pour la cellule sans CAR, l'efficacité pour la même longueur d'onde est 16.8%.

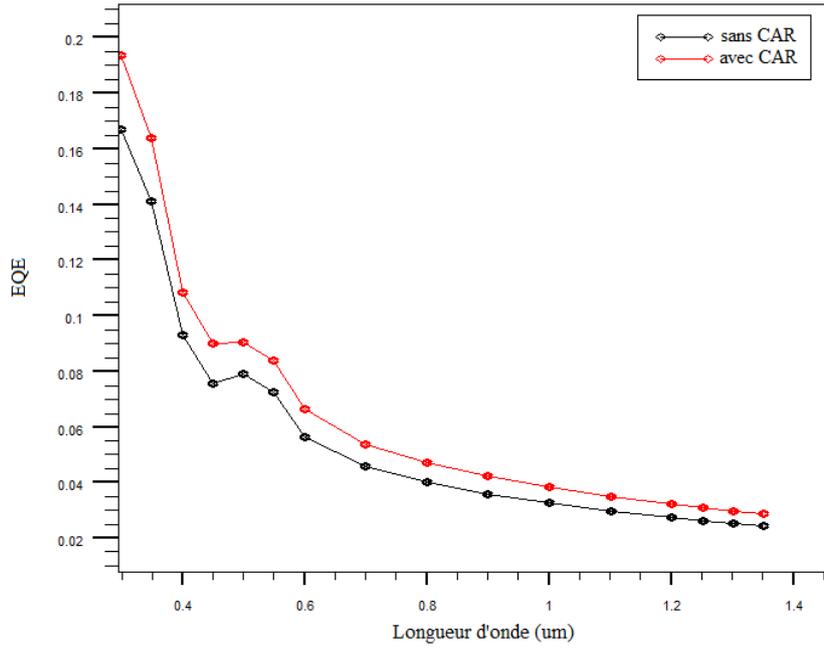


Figure III.23 – Efficacité quantique externe de la cellule modélisée avec CAR et sans CAR.

La réponse spectrale d'une cellule solaire est l'une des plus riches en tests d'information actuellement réalisés dans les processus de conception et de fabrication [138]. La réponse spectrale (SR) est exprimée par [139] :

$$SR(\lambda) = \frac{J_{cc}(\lambda)}{P_{in}(\lambda)} = \frac{q\lambda}{hc} EQE. \tag{III.10}$$

Où  $J_{cc}$  est le courant de court-circuit,  $P_{in}$  est la puissance de la lumière incidente,  $\lambda$  est la longueur d'onde du photon,  $q$  est la charge électronique,  $h$  est la constante de Planck et  $c$  est la vitesse de la lumière.

La figure III.24 présente la réponse spectrale de notre structure modélisée avec et sans la couche antireflet. Nous obtenons une densité de courant cathodique maximale de 4.9 mA/cm<sup>2</sup> et 5.8 mA/cm<sup>2</sup> pour la cellule sans CAR et avec CAR, respectivement ; pour une longueur d'onde de 500 nm.

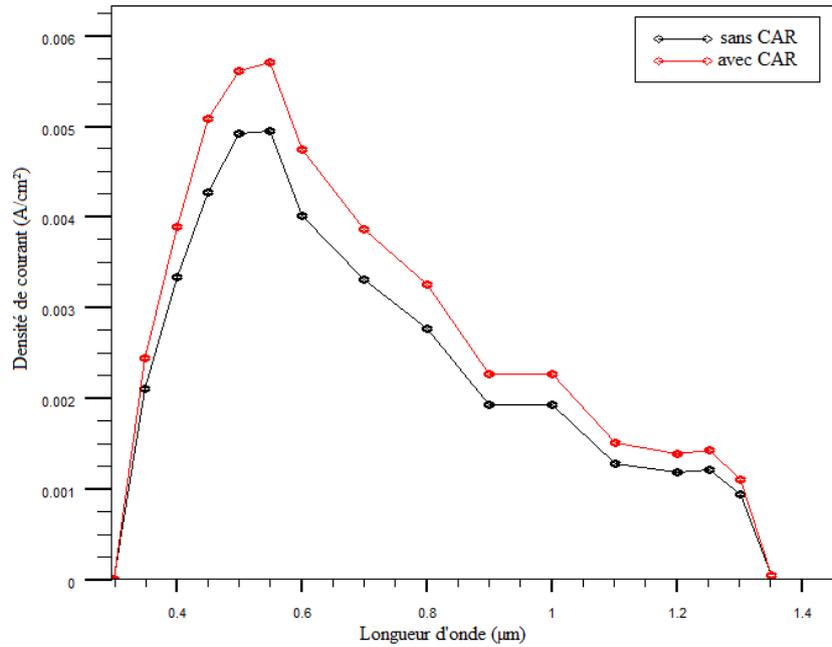


Figure III.24 – Réponse spectrale de la cellule tandem sans et avec CAR.

### III.4 Conclusion

Dans ce dernier chapitre nous avons représenté le travail de simulation effectué durant la thèse. Nous avons expliqué les différents modèles physiques que nous avons utilisés dans les simulations. Ensuite, nous avons présenté le logiciel utilisé, Atlas SILAVCO, avec lequel nous avons mené nos simulations. La cellule a été formée par deux sous-cellules  $p\text{-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/i\text{-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/n\text{-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  avec une concentration d'indium de 0.05 et 0.15 ; et simulée en utilisant une illumination AM1.5. La caractéristique J-V de la sous-cellule pour différentes compositions d'indium a été étudiée en premier temps. Après, nous avons simulé les différentes cellules tandem possibles avec les concentrations d'indium de 0.05, 0.15, 0.22, et 0.35. Nous avons noté que des meilleurs paramètres ( $J_{SC}$ ,  $V_{OC}$ , et  $\eta$ ) sont obtenus pour des compositions d'indium égal à 0.05 et 0.15, pour la sous cellule supérieure et la sous cellule inférieure, respectivement. Par la suite, nous avons étudié l'effet du dopage et de l'épaisseur des différentes couches sur les performances de la cellule. L'effet de la température sur les performances de la cellule modélisée a été aussi étudié. Enfin, nous avons étudié l'influence de la texturation de la cellule.

## CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES

---

L'objectif de ce travail de thèse était de développer une structure tandem de cellule solaire à base d'InGaN, en simulant et en optimisant les différents paramètres de la cellule afin d'améliorer ses performances.

Dans le premier chapitre, nous avons expliqué les bases de la technologie photovoltaïque. Après avoir présenté en détail, le spectre solaire, sa composition, son intensité au sol, ainsi que les différents paramètres influant cette intensité ; nous avons décrit le principe de fonctionnement d'une jonction PN et d'une cellule solaire. Les différents paramètres des cellules solaires ont été présentés ; et enfin, une étude récapitulative des différentes filières photovoltaïques existantes en donnant leur record de rendement, a été présentée.

Sa bande interdite qui varie de 0.65 eV à 3.4 eV et qui couvre presque tout le spectre solaire, sa résistance aux rayonnements de haute énergie et son fort coefficient d'absorption ( $10^5 \text{ cm}^{-1}$ ) font du composé ternaire InGaN, un matériau de choix pour les dispositifs photovoltaïques (PV) de haute efficacité. Dans la deuxième partie de ce travail, nous avons vu que les propriétés d'InGaN permettent de fabriquer des cellules solaires multijonctions ultraminces avec une longue durée de vie et un bon rendement, en variant seulement la fraction d'indium. Cependant, ce matériau possède plusieurs inconvénients dans lesquels on trouve la difficulté de croître des couches d'InGaN de faible énergie de bande interdite (forte concentration d'indium), les mauvaises qualités des couches InGaN de type p, et le manque de substrat adapté (désaccord de mailles et coefficients d'expansion thermique différents).

Dans la troisième et dernière partie, nous avons présenté les résultats de simulation obtenus. D'abord, nous avons présenté le logiciel Atlas de SILVACO avec lequel nous avons réalisé nos simulations ainsi que les modèles et les équations utilisés par ce logiciel. Par la suite, nous avons présenté notre étude réalisée au cours de ce travail. La cellule tandem modélisée se composait de deux sous cellules à homojonction de type p-i-n, à base d'InGaN. Nous avons fait varier les différents paramètres (épaisseurs, dopages, etc.) afin d'optimiser les performances de la cellule photovoltaïque. Nous avons effectué cette optimisation pour des compositions d'indium égales à 0.05 dans la sous-cellule supérieure et 0.15 dans la sous-cellule inférieure. Ensuite, nous avons étudié l'influence de la température sur les performances de la cellule tandem, et nous avons fini cette partie par l'étude de l'apport d'une couche antireflet à la surface de la cellule.

Les résultats obtenus pour la cellule mono et homojonction de type p-i-n étudiée dans ce travail sont proches de ceux trouvés expérimentalement par Liwen Sang et al [132]. Pour la structure à double jonction de type p-i-n que nous avons modélisée, nous avons obtenu de bons résultats par rapport à ceux donnés par la structure à monojonction. Un rendement de 8.43% était obtenu. Le tableau ci-dessous récapitule les résultats obtenus dans notre étude.

Mais avant cela, nous émettrions quelques travaux qui pourraient être des perspectives complétant ce travail :

- L'étude de l'effet des défauts dans InGaN sur les performances de la cellule tandem.
- L'optimisation d'une structure tandem à trois sous cellules ou plus : dans cette étude, il s'agirait de simuler une structure à homojonction et une autre à hétérojonction, en associant des sous-cellules au matériau InGaN à des sous-cellules à base de silicium ou des matériaux III-V.
- L'optimisation d'une structure tandem à hétérojonction GaN/InGaN de type p-i-n qui contiendrait deux sous-cellules, trois sous-cellules, ou plus.

Paramètres d'optimisation		Valeurs optimales		
Sous-cellule supérieure	$d_i (nm)$	400		
	$N_i (cm^{-3})$	$10^{14}$		
	$N_a (cm^{-3})$	$5.10^{17}$		
	$x_1$	0.05		
Sous-cellule inférieure	$d_i (nm)$	400		
	$N_i (cm^{-3})$	$10^{14}$		
	$N_a (cm^{-3})$	$10^{16}$		
	$x_2$	0.15		
Couche GaN	$d_p (nm)$	30		
	$N_a (cm^{-3})$	$10^{19}$		
<b>Performances de la cellule tandem</b>				
	$J_{CC} (mA/cm^2)$	$V_{CO} (V)$	FF	$\eta (%)$
	3.08	2.50	89.82	6.92
<b>Effet de la température (T)</b>				
<b>T (K)</b>	$J_{CC} (mA/cm^2)$	$V_{CO} (V)$	FF	$\eta (%)$
<b>200</b>	2.94	2.69	92.29	7.29
<b>300</b>	2.99	2.51	90.05	6.79
<b>400</b>	3.002	2.20	86.46	5.73
<b>500</b>	3.00	1.88	82.03	4.63
<b>Effet de la couche antireflet (CAR)</b>				
	$J_{CC} (mA/cm^2)$	$V_{CO} (V)$	FF	$\eta (%)$
<b>Sans CAR</b>	2.94	2.69	92.29	7.29
<b>Avec CAR</b>	3.39	2.69	92.25	8.43

## REFERENCES

---

- [1] F. A. Ponce, « Novel semiconductors for sustainable solar energy technologies », *J. Phys.: Conf. Ser.*, vol. 1173, p. 012001, févr. 2019, doi: 10.1088/1742-6596/1173/1/012001.
- [2] M. H. Shubbak, « Advances in solar photovoltaics: Technology review and patent trends », *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 115, p. 109383, nov. 2019, doi: 10.1016/j.rser.2019.109383.
- [3] « Best Research-Cell Efficiency Chart ». <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html> (consulté le mars 30, 2020).
- [4] E. R. Weber, « Photovoltaics moving into the terawatt age », in *Next Generation Technologies for Solar Energy Conversion VIII*, San Diego, United States, août 2017, p. 202, doi: 10.1117/12.2277978.
- [5] W. Shockley et H. J. Queisser, « Detailed Balance Limit of Efficiency of p-n Junction Solar Cells », p. 11, 2016.
- [6] M. A. Green, E. D. Dunlop, D. H. Levi, J. Hohl-Ebinger, M. Yoshita, et A. W. Y. Ho-Baillie, « Solar cell efficiency tables (version 54) », *Prog Photovolt Res Appl*, vol. 27, n° 7, p. 565-575, juill. 2019, doi: 10.1002/pip.3171.
- [7] C. A. M. Fabien et W. A. Doolittle, « Guidelines and limitations for the design of high-efficiency InGaN single-junction solar cells », *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 130, p. 354-363, nov. 2014, doi: 10.1016/j.solmat.2014.07.018.
- [8] R. Dahal, J. Li, K. Aryal, J. Y. Lin, et H. X. Jiang, « InGaN/GaN multiple quantum well concentrator solar cells », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 97, n° 7, p. 073115, août 2010, doi: 10.1063/1.3481424.
- [9] K. A. Bulashevich et S. Yu. Karpov, « Assessment of factors limiting conversion efficiency of single-junction III-nitride solar cells: Assessment of factors limiting conversion efficiency of single-junction III-nitride solar cells », *Phys. Status Solidi C*, vol. 11, n° 3-4, p. 640-643, févr. 2014, doi: 10.1002/pssc.201300389.
- [10] K. Ramalingam et C. Indulkar, « Solar Energy and Photovoltaic Technology », in *Distributed Generation Systems*, Elsevier, 2017, p. 69-147.
- [11] G. W. Art, Français : Les spectres du Soleil, théorique, sur, et sous l'atmosphère. 2011.
- [12] I. Sarbu et C. Sebarchievici, « Solar Radiation », in *Solar Heating and Cooling Systems*, Elsevier, 2017, p. 13-28.

- [13] Z. Salameh, « Photovoltaic », in *Renewable Energy System Design*, Elsevier, 2014, p. 33-113.
- [14] I. Sarbu et M. Adam, « Applications of solar energy for domestic hot–water and buildings heating/cooling », vol. 5, n° 2, p. 9, 2011.
- [15] C. Riordan et R. Hulstron, « What is an air mass 1.5 spectrum? (solar cell performance calculations) », in *IEEE Conference on Photovoltaic Specialists*, Kissimmee, FL, USA, 1990, p. 1085-1088, doi: 10.1109/PVSC.1990.111784.
- [16] J. Fieducik, « The use of solar radiation for generating heat in a solar air collector in northern Poland », *E3S Web Conf.*, vol. 100, p. 00016, 2019, doi: 10.1051/e3sconf/201910000016.
- [17] K. A. Mazzio et C. K. Luscombe, « The future of organic photovoltaics », *Chem. Soc. Rev.*, vol. 44, n° 1, p. 78-90, 2015, doi: 10.1039/C4CS00227J.
- [18] D. A. Neamen, *Semiconductor physics and devices: basic principles*, 3rd ed. Boston: McGraw-Hill, 2003.
- [19] N. W. Ashcroft et N. D. Mermin, *Physique des solides*. 2002.
- [20] P. O. Bonnaud, « Physique des Solides, des Semiconducteurs et Dispositifs », p. 157.
- [21] T. Soga, « Fundamentals of Solar Cell », in *Nanostructured Materials for Solar Energy Conversion*, Elsevier, 2006, p. 3-43.
- [22] L. G. Paterno, « 1 - Nanomaterials: Solar Energy Conversion », p. 33.
- [23] B. Viswanathan, « Introduction », in *Energy Sources*, Elsevier, 2017, p. 1-28.
- [24] P. Mohanty et A. Tyagi, « Introduction to Solar Photovoltaic Technology », in *Food, Energy, and Water*, Elsevier, 2015, p. 309-348.
- [25] A. E. Brooks, « Solar Energy », in *Future Energy*, Elsevier, 2014, p. 383-404.
- [26] K. SOTERIS A, « McEvoy's Handbook of Photovoltaics: Fundamentals and Applications », Elsevier, p. 1340, 2017.
- [27] E. Płaczek-Popko, « Top PV market solar cells 2016 », *Opto-Electronics Review*, vol. 25, n° 2, p. 55-64, juin 2017, doi: 10.1016/j.opelre.2017.03.002.
- [28] Z. Abdin <sup>a,\*</sup>, M.A.Alim <sup>b</sup>, R.Saidur <sup>b</sup>, M.R.Islam <sup>b</sup>, W.Rashmi <sup>c</sup>, S.Mekhilef <sup>a</sup>, A.Wadi <sup>b</sup>, « Solar energy harvesting with the application of nanotechnology », *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 26, p. 837-852, oct. 2013, doi: 10.1016/j.rser.2013.06.023.
- [29] V A Milichko, A S Shalin, I S Mukhin, A E Kovrov, A A Krasilin, A V Vinogradov, P A Belov, C R Simovski, « Solar photovoltaics: current state and trends », p. 47.

- [30] T. Matsui, H. Sai, A. Bidiville, H.-J. Hsu, et K. Matsubara, « Progress and limitations of thin-film silicon solar cells », *Solar Energy*, vol. 170, p. 486-498, août 2018, doi: 10.1016/j.solener.2018.05.077.
- [31] R. Corkish, « Solar Cells », in *Reference Module in Earth Systems and Environmental Sciences*, Elsevier, 2013, p. B9780124095489016000.
- [32] T. Baines, T. P. Shalvey, et J. D. Major, « CdTe Solar Cells », in *A Comprehensive Guide to Solar Energy Systems*, Elsevier, 2018, p. 215-232.
- [33] T. M. Razykov, C. S. Ferekides, D. Morel, E. Stefanakos, H. S. Ullal, et H. M. Upadhyaya, « Solar photovoltaic electricity: Current status and future prospects », *Solar Energy*, vol. 85, n° 8, p. 1580-1608, août 2011, doi: 10.1016/j.solener.2010.12.002.
- [34] S. Sundaram, « 18 - Thin Film Photovoltaics », p. 10.
- [35] M. K. Assadi, S. Bakhoda, R. Saidur, et H. Hanaei, « Recent progress in perovskite solar cells », *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 81, p. 2812-2822, janv. 2018, doi: 10.1016/j.rser.2017.06.088.
- [36] C. R. Kalaiselvi, N. Muthukumarasamy, D. Velauthapillai, M. Kang, et T. S. Senthil, « Importance of halide perovskites for next generation solar cells – A review », *Materials Letters*, vol. 219, p. 198-200, mai 2018, doi: 10.1016/j.matlet.2018.02.089.
- [37] A.B. Djurisić<sup>a,\*</sup>, F.Z. Liu<sup>a</sup>, H.W. Tam<sup>a</sup>, M.K. Wong<sup>a</sup>, A. Ng<sup>b</sup>, C. Surya<sup>b</sup>, W. Chen<sup>a,c</sup>, Z.B. He<sup>c</sup>, « Perovskite solar cells - An overview of critical issues », *Progress in Quantum Electronics*, vol. 53, p. 1-37, mai 2017, doi: 10.1016/j.pquantelec.2017.05.002.
- [38] I. Vurgaftman et J. R. Meyer, « Band parameters for nitrogen-containing semiconductors », *Journal of Applied Physics*, vol. 94, n° 6, p. 3675-3696, sept. 2003, doi: 10.1063/1.1600519.
- [39] C. X. Ren, « Polarisation fields in III-nitrides: effects and control », *Materials Science and Technology*, p. 1-16, mars 2016, doi: 10.1179/1743284715Y.0000000103.
- [40] K. Sarasamak, A. J. Kulkarni, M. Zhou, et S. Limpijumnong, « Stability of wurtzite, unbuckled wurtzite, and rocksalt phases of SiC, GaN, InN, ZnO, and CdSe under loading of different triaxialities », *Phys. Rev. B*, vol. 77, n° 2, p. 024104, janv. 2008, doi: 10.1103/PhysRevB.77.024104.
- [41] Jesus Zuniga-Perez,<sup>1,a)</sup> Vincent Consonni,<sup>2,a)</sup> Liverios Lymperakis,<sup>3</sup> Xiang Kong,<sup>4</sup> Achim Trampert,<sup>4</sup> Sergio Fernandez-Garrido,<sup>4</sup> Oliver Brandt,<sup>4</sup> Hubert Renevier,<sup>2</sup> Stacia

- Keller,<sup>5</sup> Karine Hestroffer,<sup>5</sup> Markus R. Wagner,<sup>6</sup> Juan Sebastian Reparaz,<sup>6</sup> Fatih Akyol,<sup>7</sup> Siddharth Rajan,<sup>7</sup> Stephanie Rennesson,<sup>8</sup> Tomas Palacios,<sup>8</sup> et Guy Feuillet<sup>9,a)</sup>, « Polarity in GaN and ZnO: Theory, measurement, growth, and devices », *Applied Physics Reviews*, vol. 3, n° 4, p. 041303, déc. 2016, doi: 10.1063/1.4963919.
- [42] D. Ehrentraut, E. Meissner, et M. Bockowski, Éd., *Technology of Gallium Nitride Crystal Growth*, vol. 133. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2010.
- [43] O. Ambacher,<sup>a)</sup> J. Smart, J. R. Shealy, N. G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, W. J. Schaff, et L. F. Eastman, « Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization charges in N- and Ga-face AlGaIn/GaN heterostructures », *Journal of Applied Physics*, vol. 85, n° 6, p. 3222-3233, mars 1999, doi: 10.1063/1.369664.
- [44] F. Bernardini, V. Fiorentini, et D. Vanderbilt, « Accurate calculation of polarization-related quantities in semiconductors », *Phys. Rev. B*, vol. 63, n° 19, p. 193201, avr. 2001, doi: 10.1103/PhysRevB.63.193201.
- [45] K. M. Kelchner, S. P. DenBaars, et J. S. Speck, « GaN Laser Diodes on Nonpolar and Semipolar Planes », in *Semiconductors and Semimetals*, vol. 86, Elsevier, 2012, p. 149-182.
- [46] A. Konar, A. Verma, T. Fang, P. Zhao, R. Jana, et D. Jena, « Charge transport in non-polar and semi-polar III-V nitride heterostructures », *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 27, n° 2, p. 024018, févr. 2012, doi: 10.1088/0268-1242/27/2/024018.
- [47] S. C. Jain, M. Willander, J. Narayan, et R. V. Overstraeten, « III-nitrides: Growth, characterization, and properties », *Journal of Applied Physics*, vol. 87, n° 3, p. 965-1006, févr. 2000, doi: 10.1063/1.371971.
- [48] O. Ambacher<sup>1</sup>, J. Majewski<sup>1</sup>, C. Miskys<sup>1</sup>, A. Link<sup>1</sup>, M. Hermann<sup>1</sup>, M. Eickhoff<sup>1</sup>, M. Stutzmann<sup>1</sup>, F. Bernardini<sup>2</sup>, V. Fiorentini<sup>2</sup>, V. Tilak<sup>3</sup>, B. Schaff<sup>3</sup> et L. F. Eastman<sup>3</sup>, « Pyroelectric properties of Al(In)GaIn/GaN hetero- and quantum well structures », *J. Phys.: Condens. Matter*, vol. 14, n° 13, p. 3399-3434, avr. 2002, doi: 10.1088/0953-8984/14/13/302.
- [49] A. F. Wright, « Elastic properties of zinc-blende and wurtzite AlN, GaN, and InN », *Journal of Applied Physics*, vol. 82, n° 6, p. 2833-2839, sept. 1997, doi: 10.1063/1.366114.

- [50] E. T. Yu, X. Z. Dang, P. M. Asbeck, S. S. Lau, et G. J. Sullivan, « Spontaneous and piezoelectric polarization effects in III–V nitride heterostructures », *J. Vac. Sci. Technol. B*, vol. 17, n° 4, p. 1742, 1999, doi: 10.1116/1.590818.
- [51] O. Ambacher, « Growth and applications of Group III-nitrides », *J. Phys. D: Appl. Phys.*, vol. 31, n° 20, p. 2653-2710, oct. 1998, doi: 10.1088/0022-3727/31/20/001.
- [52] F. Bernardini et V. Fiorentini, « Nonlinear macroscopic polarization in III-V nitride alloys », *Phys. Rev. B*, vol. 64, n° 8, p. 085207, août 2001, doi: 10.1103/PhysRevB.64.085207.
- [53] V. Fiorentini, F. Bernardini, et O. Ambacher, « Evidence for nonlinear macroscopic polarization in III–V nitride alloy heterostructures », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 80, n° 7, p. 1204-1206, févr. 2002, doi: 10.1063/1.1448668.
- [54] L. Liu et J. H. Edgar, « Substrates for gallium nitride epitaxy », *Materials Science and Engineering: R: Reports*, vol. 37, n° 3, p. 61-127, avr. 2002, doi: 10.1016/S0927-796X(02)00008-6.
- [55] B. Monemar et G. Pozina, « Group III-nitride based hetero and quantum structures », *Progress in Quantum Electronics*, vol. 24, n° 6, p. 239-290, nov. 2000, doi: 10.1016/S0079-6727(00)00009-4.
- [56] Miguel A Caro<sup>1,2</sup>, Siyuan Zhang<sup>3</sup>, Tommi Riekkinen<sup>4</sup>, Markku Ylilammi<sup>4</sup>, Michelle A Moram<sup>3,5</sup>, Olga Lopez-Acevedo<sup>2</sup>, Jyrki Molarius<sup>4</sup> et Tomi Laurila<sup>1</sup>, « Piezoelectric coefficients and spontaneous polarization of ScAlN », *J. Phys.: Condens. Matter*, vol. 27, n° 24, p. 245901, juin 2015, doi: 10.1088/0953-8984/27/24/245901.
- [57] J. C. Freeman, « Basic Equations for the Modeling of Gallium Nitride (GaN) High Electron Mobility Transistors (HEMTs) », p. 70, 2003.
- [58] J. Wu, « When group-III nitrides go infrared: New properties and perspectives », *Journal of Applied Physics*, vol. 106, n° 1, p. 011101, juill. 2009, doi: 10.1063/1.3155798.
- [59] A. Svane, N. E. Christensen, I. Gorczyca, M. van Schilfgaarde, A. N. Chantis, et T. Kotani, « Quasiparticle self-consistent GW theory of III-V nitride semiconductors: Bands, gap bowing, and effective masses », *Phys. Rev. B*, vol. 82, n° 11, p. 115102, sept. 2010, doi: 10.1103/PhysRevB.82.115102.
- [60] I. Gorczyca,<sup>1,a)</sup> J. Plesiewicz,<sup>1</sup> L. Dmowski,<sup>1</sup> T. Suski,<sup>1</sup> N. E. Christensen,<sup>2</sup> A. Svane,<sup>2</sup> C. S. Gallinat,<sup>3</sup> G. Koblmüller,<sup>3</sup> and J. S. Speck<sup>3</sup>, « Band structure and effective mass

- of InN under pressure », *phys. stat. sol. (b)*, vol. 245, n° 5, p. 887-889, mai 2008, doi: 10.1002/pssb.200778548.
- [61] H. Morkoç, *Handbook of Nitride Semiconductors and Devices, Materials Properties, Physics and Growth*. John Wiley & Sons, 2009.
- [62] F. K. Yam et Z. Hassan, « InGaN: An overview of the growth kinetics, physical properties and emission mechanisms », *Superlattices and Microstructures*, vol. 43, n° 1, p. 1-23, janv. 2008, doi: 10.1016/j.spmi.2007.05.001.
- [63] G. Orsal,<sup>1,2,3,\*</sup> Y. El Gmili,<sup>3</sup> N. Fressengeas,<sup>1,2,3</sup> J. Streque,<sup>3</sup> R. Djerboub,<sup>1,2,3</sup> T. Moudakir,<sup>3</sup> S. Sundaram,<sup>3</sup> A. Ougazzaden,<sup>3,4</sup> et J.P. Salvestrini<sup>1,2,3</sup>, « Bandgap energy bowing parameter of strained and relaxed InGaN layers », *Opt. Mater. Express*, vol. 4, n° 5, p. 1030, mai 2014, doi: 10.1364/OME.4.001030.
- [64] Md. R. Islam, Md. R. Kaysir, Md. J. Islam, A. Hashimoto, et A. Yamamoto, « MOVPE Growth of In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N (x ~ 0.4) and Fabrication of Homo-junction Solar Cells », *Journal of Materials Science & Technology*, vol. 29, n° 2, p. 128-136, févr. 2013, doi: 10.1016/j.jmst.2012.12.005.
- [65] M. Kurouchi, T. Araki, H. Naoi, T. Yamaguchi, A. Suzuki, et Y. Nanishi, « Growth and properties of In-rich InGaN films grown on (0001) sapphire by RF-MBE », *phys. stat. sol. (b)*, vol. 241, n° 12, p. 2843-2848, oct. 2004, doi: 10.1002/pssb.200405121.
- [66] J. Wu<sup>1, 2</sup>, W. Walukiewicz<sup>\*, 1</sup>, K. M. Yu<sup>1</sup>, J. W. Ager III<sup>1</sup>, E. E. Haller<sup>1, 2</sup>, Hai Lu<sup>3</sup>, et William J. Schaff<sup>3</sup>, « Narrow bandgap group III-nitride alloys », *phys. stat. sol. (b)*, vol. 240, n° 2, p. 412-416, nov. 2003, doi: 10.1002/pssb.200303475.
- [67] X. Q. Shen, T. Ide, M. Shimizu, et H. Okumura, « Growth and characterizations of InGaN on N- and Ga-polarity GaN grown by plasma-assisted molecular-beam epitaxy », *Journal of Crystal Growth*, vol. 237-239, p. 1148-1152, avr. 2002, doi: 10.1016/S0022-0248(01)02073-5.
- [68] O. Donmez, M. Gunes, A. Erol, M. C. Arıkan, et N. Balkan, « High carrier concentration induced effects on the bowing parameter and the temperature dependence of the band gap of Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>N », *Journal of Applied Physics*, vol. 110, n° 10, p. 103506, nov. 2011, doi: 10.1063/1.3660692.
- [69] William J. Schaff<sup>\*, 1</sup>, Xiaodong Chen<sup>1</sup>, Dong Hao<sup>1</sup>, Kris Matthews<sup>1</sup>, Troy Richards<sup>1</sup>, Lester F. Eastman<sup>1</sup>, Hai Lu<sup>2</sup>, Clara Ji-Hyun Cho<sup>3</sup>, and Ho-Young Cha<sup>4</sup>, « Electrical properties of InGaN grown by molecular beam epitaxy », *phys. stat. sol. (b)*, vol. 245, n° 5, p. 868-872, mai 2008, doi: 10.1002/pssb.200778710.

- [70] X. M. Duan et C. Stampfl, « Nitrogen vacancies in InN: Vacancy clustering and metallic bonding from first principles », *Phys. Rev. B*, vol. 77, n° 11, p. 115207, mars 2008, doi: 10.1103/PhysRevB.77.115207.
- [71] C. Stampfl, C. G. Van de Walle, D. Vogel, P. Krüger, et J. Pollmann, « Native defects and impurities in InN: First-principles studies using the local-density approximation and self-interaction and relaxation-corrected pseudopotentials », *Phys. Rev. B*, vol. 61, n° 12, p. R7846-R7849, mars 2000, doi: 10.1103/PhysRevB.61.R7846.
- [72] G. Sabui, P. J. Parbrook, M. Arredondo-Arechavala, et Z. J. Shen, « Modeling and simulation of bulk gallium nitride power semiconductor devices », *AIP Advances*, vol. 6, n° 5, p. 055006, mai 2016, doi: 10.1063/1.4948794.
- [73] A. Alkauskas, C. E. Dreyer, J. L. Lyons, et C. G. Van de Walle, « Role of excited states in Shockley-Read-Hall recombination in wide-band-gap semiconductors », *Phys. Rev. B*, vol. 93, n° 20, p. 201304, mai 2016, doi: 10.1103/PhysRevB.93.201304.
- [74] C. E. Dreyer, A. Alkauskas, J. L. Lyons, J. S. Speck, et C. G. Van de Walle, « Gallium vacancy complexes as a cause of Shockley-Read-Hall recombination in III-nitride light emitters », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 108, n° 14, p. 141101, avr. 2016, doi: 10.1063/1.4942674.
- [75] T. Markvart et L. Castañer, « Semiconductor Materials and Modelling », in *Solar Cells*, Elsevier, 2013, p. 27-54.
- [76] E. Kioupakis, Q. Yan, D. Steiauf, et C. G. Van de Walle, « Temperature and carrier-density dependence of Auger and radiative recombination in nitride optoelectronic devices », *New J. Phys.*, vol. 15, n° 12, p. 125006, déc. 2013, doi: 10.1088/1367-2630/15/12/125006.
- [77] V. Gorge, « Caractérisations de matériaux et tests de composants des cellules solaires à base des nitrures des éléments III-V », p. 216.
- [78] M. Anani, H. Abid, Z. Chama, C. Mathieu, A. Sayede, et B. Khelifa, «  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  refractive index calculations », *Microelectronics Journal*, vol. 38, n° 2, p. 262-266, févr. 2007, doi: 10.1016/j.mejo.2006.11.001.
- [79] A. Laref, A. Altujar, et S. J. Luo, « The electronic and optical properties of InGaN-based solar cells alloys: First-principles investigations via mBJLDA approach », *Eur. Phys. J. B*, vol. 86, n° 11, p. 475, nov. 2013, doi: 10.1140/epjb/e2013-40487-2.
- [80] M. Shakil<sup>\*,a</sup>, M. K. Masood, M. Zafar<sup>b</sup>, Shabir Ahmad<sup>c</sup>, Abrar Hussain<sup>a</sup>, M. A. Gadhi<sup>c</sup>, S. A. Buzdar<sup>c</sup>, T. Iqbal<sup>a</sup>, « Theoretical study of structural, electronic and optical

- properties of  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  alloys », *Optik*, vol. 174, p. 739-747, déc. 2018, doi: 10.1016/j.ijleo.2018.08.083.
- [81] E. Giraud, « Optical and transport properties of GaN/(Al,Ga)N heterostructures in prospect of infrared unipolar devices », p. 144.
- [82] R. Dwilinski <sup>a,\*</sup>, R. Doradzinski <sup>a</sup>, J. Garczynski <sup>a</sup>, L.P. Sierzputowski <sup>a</sup>, A. Puchalski <sup>a</sup>, Y. Kanbara <sup>b</sup>, K. Yagi <sup>b</sup>, H. Minakuchi <sup>b</sup>, H. Hayashi <sup>b</sup>, « Excellent crystallinity of truly bulk ammonothermal GaN », *Journal of Crystal Growth*, vol. 310, n° 17, p. 3911-3916, août 2008, doi: 10.1016/j.jcrysgro.2008.06.036.
- [83] Junxue Ran, Xiaoliang Wang\*, Guoxin Hu, Jianping Li, Baozhu Wang, Hongling Xiao, Junxi Wang, Yiping Zeng, Jinmin Li, Zhanguo Wang, « Effects of doping on the crystalline quality and composition distribution in InGaN/GaN structure grown by MOCVD », *Journal of Crystal Growth*, vol. 298, p. 235-238, janv. 2007, doi: 10.1016/j.jcrysgro.2006.10.023.
- [84] A. Kraus <sup>a,\*</sup>, S.Hammadi <sup>a</sup>, J.Hisek <sup>a</sup>, R.Buß <sup>a</sup>, H.Jönen <sup>a</sup>, H.Bremers <sup>a</sup>, U.Rossow <sup>a</sup>, E.Sakalauskas <sup>b</sup>, R. Goldhahn <sup>b,c</sup>, A.Hangleiter <sup>a</sup>, « Growth and characterization of InGaN by RF-MBE », *Journal of Crystal Growth*, vol. 323, n° 1, p. 72-75, mai 2011, doi: 10.1016/j.jcrysgro.2010.10.124.
- [85] K. Kim, W. R. L. Lambrecht, et B. Segall, « Elastic constants and related properties of tetrahedrally bonded BN, AlN, GaN, and InN », *Phys. Rev. B*, vol. 53, n° 24, p. 16310-16326, juin 1996, doi: 10.1103/PhysRevB.53.16310.
- [86] C. A. Parker, J. C. Roberts, S. M. Bedair, M. J. Reed, S. X. Liu, et N. A. El-Masry, « Determination of the critical layer thickness in the InGaN/GaN heterostructures », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 75, n° 18, p. 2776-2778, nov. 1999, doi: 10.1063/1.125146.
- [87] M. J. Reed, N. A. El-Masry, C. A. Parker, J. C. Roberts, et S. M. Bedair, « Critical layer thickness determination of GaN/InGaN/GaN double heterostructures », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 77, n° 25, p. 4121-4123, déc. 2000, doi: 10.1063/1.1334361.
- [88] Tetsuya. Takeuchi, Shigetoshi Sota, Maki Katsuragawa, Miho Komori, Hideo Takeuchi, Hiroshi Amano et Isamu Akasaki, « Quantum-Confined Stark Effect due to Piezoelectric Fields in GaInN Strained Quantum Wells », *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 36, n° Part 2, No. 4A, p. L382-L385, avr. 1997, doi: 10.1143/JJAP.36.L382.
- [89] M. Leyer, J. Stellmach, Ch. Meissner, M. Pristovsek, et M. Kneissl, « The critical thickness of InGaN on (0001)GaN », *Journal of Crystal Growth*, vol. 310, n° 23, p. 4913-4915, nov. 2008, doi: 10.1016/j.jcrysgro.2008.08.021.

- [90] A. Fischer, H. Kühne, et H. Richter, « New Approach in Equilibrium Theory for Strained Layer Relaxation », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 73, n° 20, p. 2712-2715, nov. 1994, doi: 10.1103/PhysRevLett.73.2712.
- [91] W. Zhao, L. Wang, J. Wang, Z. Hao, et Y. Luo, « Theoretical study on critical thicknesses of InGaN grown on (0001) GaN », *Journal of Crystal Growth*, vol. 327, n° 1, p. 202-204, juill. 2011, doi: 10.1016/j.jcrysgro.2011.05.002.
- [92] Y. E. Gmili, « Étude et caractérisations par cathodoluminescence de couches minces d'InGaN pour le photovoltaïque », p. 199.
- [93] F. Kwong, L. Li, S. Ann, et Z. Hass, « Gallium Nitride: An Overview of Structural Defects », in *Optoelectronics - Materials and Techniques*, P. Predeep, Éd. InTech, 2011.
- [94] J.-M. Bethoux, « Relaxation des contraintes dans les hétérostructures épaisses (Al,Ga)N: une piste originale pour la réalisation de diodes électroluminescentes à cavité résonante », p. 181.
- [95] L. Lu,<sup>1</sup> Z. Y. Gao,<sup>2</sup> B. Shen,<sup>1,a)</sup> F. J. Xu,<sup>1</sup> S. Huang,<sup>1</sup> Z. L. Miao,<sup>1</sup> Y. Hao,<sup>2</sup> Z. J. Yang,<sup>1</sup> G. Y. Zhang,<sup>1</sup> X. P. Zhang,<sup>3</sup> J. Xu,<sup>3</sup> et D. P. Yu<sup>3</sup>, « Microstructure and origin of dislocation etch pits in GaN epilayers grown by metal organic chemical vapor deposition », *J. Appl. Phys.*, p. 5.
- [96] Y. Zhang, M. J. Kappers, D. Zhu, F. Oehler, F. Gao, et C. J. Humphreys, « The effect of dislocations on the efficiency of InGaN/GaN solar cells », *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 117, p. 279-284, oct. 2013, doi: 10.1016/j.solmat.2013.06.022.
- [97] H. M. Ng, D. Doppalapudi, D. Korakakis, R. Singh, et T. D. Moustakas, « MBE growth and doping of III-V nitrides », *Journal of Crystal Growth*, vol. 189-190, p. 349-353, juin 1998, doi: 10.1016/S0022-0248(98)00291-7.
- [98] A. Adaine, « Optimisation numérique de cellules solaires à très haut rendement à base d'InGaN », p. 175.
- [99] A. Janotti et C. G. Van de Walle, « Sources of unintentional conductivity in InN », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 92, n° 3, p. 032104, janv. 2008, doi: 10.1063/1.2832369.
- [100] S. Nakamura, T. Mukai, et M. Senoh, « Si- and Ge-Doped GaN Films Grown with GaN Buffer Layers », *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 31, n° Part 1, No. 9A, p. 2883-2888, sept. 1992, doi: 10.1143/JJAP.31.2883.

- [101] W. Walukiewicz, « Intrinsic limitations to the doping of wide-gap semiconductors », *Physica B: Condensed Matter*, vol. 302-303, p. 123-134, janv. 2001, doi: 10.1016/S0921-4526(01)00417-3.
- [102] J. Wu, W. Walukiewicz,<sup>a)</sup> K. M. Yu, W. Shan, et J. W. Ager III, « Superior radiation resistance of In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>N alloys: Full-solar-spectrum photovoltaic material system », *Journal of Applied Physics*, vol. 94, n° 10, p. 6477-6482, nov. 2003, doi: 10.1063/1.1618353.
- [103] Omkar Jani<sup>1</sup>, Hongbo Yu<sup>1</sup>, Elaissa Trybus<sup>1</sup>, Balakrishnam Jampana<sup>2</sup>, Ian Ferguson<sup>1</sup>, Alan Doolittle<sup>1</sup>, Christiana Honsberg<sup>2</sup>, « EFFECT OF PHASE SEPARATION ON PERFORMANCE OF III-V NITRIDE SOLAR CELLS », p. 4, 2007.
- [104] X. Cai, S. Zeng, et B. Zhang, « Fabrication and characterization of InGaN p-i-n homojunction solar cell », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 95, n° 17, p. 173504, oct. 2009, doi: 10.1063/1.3254215.
- [105] A. Yamamoto, Md. R. Islam, T.-T. Kang, et A. Hashimoto, « Recent advances in InN-based solar cells: status and challenges in InGaN and InAlN solar cells », *Phys. Status Solidi (c)*, vol. 7, n° 5, p. 1309-1316, mars 2010, doi: 10.1002/pssc.200983106.
- [106] Balakrishnam R. Jampana, *Student Member, IEEE*, Andrew G. Melton, *Student Member, IEEE*, Muhammad Jamil, *Member, IEEE*, Nikolai N. Faleev, Robert L. Opila, Ian T. Ferguson, *Senior Member, IEEE*, et Christiana B. Honsberg, *Member, IEEE*, « Design and Realization of Wide-Band-Gap ( $\sim 2.67$  eV) InGaN p-n Junction Solar Cell », *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 31, n° 1, p. 32-34, janv. 2010, doi: 10.1109/LED.2009.2034280.
- [107] Cuibai Yang\*, Xiaoliang Wang, Hongling Xiao, Junxue Ran, Cuimei Wang, Guoxin Hu, Xinhua Wang, Xiaobin Zhang, Jianping Li, and Jinmin Li, « Photovoltaic effects in InGaN structures with p-n junctions », *phys. stat. sol. (a)*, vol. 204, n° 12, p. 4288-4291, déc. 2007, doi: 10.1002/pssa.200723202.
- [108] X. Chen, K. D. Matthews, D. Hao, W. J. Schaff, et L. F. Eastman, « Growth, fabrication, and characterization of InGaN solar cells », *phys. stat. sol. (a)*, vol. 205, n° 5, p. 1103-1105, mai 2008, doi: 10.1002/pssa.200778695.
- [109] C. Boney\*,<sup>1, 2</sup>, I. Hernandez<sup>1</sup>, R. Pillai<sup>2</sup>, D. Starikov<sup>1, 2</sup>, A. Bensaoula<sup>3</sup>, M. Henini<sup>4</sup>, M. Syperek<sup>5</sup>, J. Misiewicz<sup>5</sup>, et R. Kudrawiec<sup>5</sup>, « Growth and characterization of InGaN for photovoltaic devices », *Phys. Status Solidi C*, vol. 8, n° 7-8, p. 2460-2462, juill. 2011, doi: 10.1002/pssc.201000993.

- [110] Xiaomei Cai, Yu Wang, Bihua Chen, Ming-Ming Liang, Wen-Jie Liu, Jiang-Yong Zhang, Xue-Qin Lv, Lei-Ying Ying, et Bao-Ping Zhang, « Investigation of InGaN p-i-n Homojunction and Heterojunction Solar Cells », *IEEE Photon. Technol. Lett.*, vol. 25, n° 1, p. 59-62, janv. 2013, doi: 10.1109/LPT.2012.2227702.
- [111] O. Jani, I. Ferguson, C. Honsberg, et S. Kurtz, « Design and characterization of GaN/InGaN solar cells », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 91, n° 13, p. 132117, sept. 2007, doi: 10.1063/1.2793180.
- [112] Xinhe Zheng,<sup>1</sup> Ray-Hua Horng,<sup>2,a)</sup> Dong-Sing Wu,<sup>1,b)</sup> Mu-Tao Chu,<sup>2</sup> Wen-Yi Liao,<sup>3</sup> Ming-Hsien Wu,<sup>3</sup> Ray-Ming Lin,<sup>4</sup> et Yuan-Chieh Lu<sup>4</sup>, « High-quality InGaN/GaN heterojunctions and their photovoltaic effects », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 93, n° 26, p. 261108, déc. 2008, doi: 10.1063/1.3056628.
- [113] C. J. Neufeld, N. G. Toledo, S. C. Cruz, M. Iza, S. P. DenBaars, et U. K. Mishra, « High quantum efficiency InGaN/GaN solar cells with 2.95 eV band gap », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 93, n° 14, p. 143502, oct. 2008, doi: 10.1063/1.2988894.
- [114] Ray-Hua Horng, *Member, IEEE*, Shih-Ting Lin, Yu-Li Tsai, Mu-Tao Chu, Wen-Yih Liao, Ming-Hsien Wu, Ray-Ming Lin, and Yuan-Chieh Lu, « Improved Conversion Efficiency of Textured InGaN Solar Cells With Interdigitated Imbedded Electrodes », *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 31, n° 6, p. 585-587, juin 2010, doi: 10.1109/LED.2010.2046615.
- [115] Elisa Matioli,<sup>1,a)</sup> Carl Neufeld,<sup>2</sup> Michael Iza,<sup>1</sup> Samantha C. Cruz,<sup>1</sup> Ali A. Al-Heji,<sup>1</sup> Xu Chen,<sup>2</sup> Robert M. Farrell,<sup>2</sup> Stacia Keller,<sup>2</sup> Steven DenBaars,<sup>1</sup> Umesh Mishra,<sup>2</sup> Shuji Nakamura,<sup>1</sup> James Speck,<sup>1</sup> and Claude Weisbuch<sup>1,3</sup>, « High internal and external quantum efficiency InGaN/GaN solar cells », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 98, n° 2, p. 021102, janv. 2011, doi: 10.1063/1.3540501.
- [116] J. R. Lang,<sup>1,a)</sup> C. J. Neufeld,<sup>2</sup> C. A. Hurni,<sup>1</sup> S. C. Cruz,<sup>1</sup> E. Matioli,<sup>1</sup> U. K. Mishra,<sup>2</sup> et J. S. Speck<sup>1</sup>, « High external quantum efficiency and fill-factor InGaN/GaN heterojunction solar cells grown by NH<sub>3</sub>-based molecular beam epitaxy », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 98, n° 13, p. 131115, mars 2011, doi: 10.1063/1.3575563.
- [117] Y.-C. Yao, M.-T. Tsai, C.-Y. Huang, T.-Y. Lin, J.-K. Sheu, et Y.-J. Lee, « Efficient collection of photogenerated carriers by inserting double tunnel junctions in III-nitride p-i-n solar cells », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 103, n° 19, p. 193503, nov. 2013, doi: 10.1063/1.4829443.

- [118] L. Sang, M. Liao, Y. Koide, et M. Sumiya, « InGaN-based thin film solar cells: Epitaxy, structural design, and photovoltaic properties », *Journal of Applied Physics*, vol. 117, n° 10, p. 105706, mars 2015, doi: 10.1063/1.4914908.
- [119] I. M. Dharmadasa, « Third generation multi-layer tandem solar cells for achieving high conversion efficiencies », *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 85, n° 2, p. 293-300, janv. 2005, doi: 10.1016/j.solmat.2004.08.008.
- [120] Xiaobin Zhang<sup>1,2</sup>, Xiaoliang Wang<sup>1,2</sup>, Hongling Xiao<sup>1</sup>, Cuibai Yang<sup>1</sup>, Junxue Ran<sup>1</sup>, Cuimei Wang<sup>1</sup>, Qifeng Hou<sup>1</sup>, Jinmin Li<sup>1</sup> et Zhanguo Wang<sup>2</sup>, « Theoretical design and performance of  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  two-junction solar cells », *J. Phys. D: Appl. Phys.*, vol. 41, n° 24, p. 245104, déc. 2008, doi: 10.1088/0022-3727/41/24/245104.
- [121] L. Hsu et W. Walukiewicz, « Modeling of InGaN/Si tandem solar cells », *Journal of Applied Physics*, vol. 104, n° 2, p. 024507, juill. 2008, doi: 10.1063/1.2952031.
- [122] M. Lourassi et B. Soudini, « Simulation of piezoelectric and spontaneous polarization effect on the InGaN/Si tandem solar cell », *Optik*, vol. 127, n° 5, p. 3091-3094, mars 2016, doi: 10.1016/j.ijleo.2015.12.037.
- [123] Zhaoying Chen,<sup>1</sup> Xiantong Zheng,<sup>1</sup> Zhilong Li,<sup>1</sup> Ping Wang,<sup>1</sup> Xin Rong,<sup>1</sup> Tao Wang,<sup>1</sup> Xuelin Yang,<sup>1</sup> Fujun Xu,<sup>1</sup> Zhixin Qin,<sup>1</sup> Weikun Ge,<sup>1</sup> Bo Shen,<sup>1,2</sup> et Xinqiang Wang<sup>1,2</sup>, « Positive temperature coefficient of photovoltaic efficiency in solar cells based on InGaN/GaN MQWs », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 109, n° 6, p. 062104, août 2016, doi: 10.1063/1.4960765.
- [124] G. F. Brown, J. W. Ager, W. Walukiewicz, et J. Wu, « Finite element simulations of compositionally graded InGaN solar cells », *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 94, n° 3, p. 478-483, mars 2010, doi: 10.1016/j.solmat.2009.11.010.
- [125] M. El-Saba, *Transport of Information-Carriers in Semiconductors and Nanodevices*: IGI Global, 2017.
- [126] S. Selberherr, *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices*. Vienna: Springer Vienna, 1984.
- [127] J. Piprek, *Semiconductor Optoelectronic Devices: Introduction to Physics and Simulation*. Elsevier, 2013.
- [128] D. M. Caughey et R. E. Thomas, « Carrier mobilities in silicon empirically related to doping and field », *Proc. IEEE*, vol. 55, n° 12, p. 2192-2193, 1967, doi: 10.1109/PROC.1967.6123.

- [129] J. W. Ho, L. Zhang, Q. Wee, A. A. O. Tay, M. Heuken, et S.-J. Chua, « Structural and morphological qualities of InGaN grown via elevated pressures in MOCVD on AlN/Si(111) substrates », *Journal of Crystal Growth*, vol. 383, p. 1-8, nov. 2013, doi: 10.1016/j.jcrysgro.2013.08.016.
- [130] S. Lin <sup>a,b</sup>, B.P. Zhang <sup>a,b,\*</sup>, S.W. Zeng <sup>a,b</sup>, X.M. Cai <sup>a,b</sup>, J.Y. Zhang <sup>a</sup>, S.X. Wu<sup>a</sup>, A.K. Ling <sup>a,b</sup>, G.E. Weng<sup>a,b</sup>, « Preparation and properties of Ni/InGaN/GaN Schottky barrier photovoltaic cells », *Solid-State Electronics*, vol. 63, n° 1, p. 105-109, sept. 2011, doi: 10.1016/j.sse.2011.05.001.
- [131] V. Gorge<sup>a</sup>, A. Migan-Dubois<sup>a</sup>, Z. Djebbour<sup>a,b,\*</sup>, K. Pantzas<sup>c,d</sup>, S. Gautier<sup>d,e</sup>, T. Moudakir<sup>d</sup>, S. Suresh<sup>d</sup>, A. Ougazzaden<sup>c,d</sup>, « Theoretical analysis of the influence of defect parameters on photovoltaic performances of composition graded InGaN solar cells », *Materials Science and Engineering: B*, vol. 178, n° 2, p. 142-148, févr. 2013, doi: 10.1016/j.mseb.2012.10.033.
- [132] P. H. Drive et S. Clara, « DEVICE SIMULATION SOFTWARE », p. 1715.
- [133] L. Sang, M. Liao, N. Ikeda, Y. Koide, et M. Sumiya, « Enhanced performance of InGaN solar cell by using a super-thin AlN interlayer », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 99, n° 16, p. 161109, oct. 2011, doi: 10.1063/1.3654155.
- [134] K. Wang, D. Imai, K. Kusakabe, et A. Yoshikawa, « Leak path passivation by in situ Al-N for InGaN solar cells operating at wavelengths up to 570 nm », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 108, n° 9, p. 092105, févr. 2016, doi: 10.1063/1.4942507.
- [135] A. Asgari et Kh. Khalili, « Temperature dependence of InGaN/GaN multiple quantum well based high efficiency solar cell », *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 95, n° 11, p. 3124-3129, nov. 2011, doi: 10.1016/j.solmat.2011.07.001.
- [136] Xiao-Mei Cai, Sheng-Wei Zeng, Xin Li, Jiang-Yong Zhang, Shuo Lin, An-Kai Ling, Ming Chen, Wen-Jie Liu, Shao-Xiong Wu, et Bao-Ping Zhang, « Dependence of the Property of InGaN p-i-n Solar Cells on the Light Concentration and Temperature », *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 58, n° 11, p. 3905-3911, nov. 2011, doi: 10.1109/TED.2011.2166118.
- [137] Han Cheng Lee<sup>a</sup>, Yan Kuin Su<sup>a,d,n</sup>, Wen kwei Chuang<sup>a</sup>, Jia Ching Lin<sup>b</sup>, Kuo Chin Huang<sup>c</sup>, Yi Cheng Cheng<sup>b</sup>, Kuo Jen Chang<sup>b</sup>, « Discussion on electrical characteristics of i-In<sub>0.13</sub>Ga<sub>0.87</sub>N p-i-n photovoltaics by using a single/multi-antireflection layer », *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 94, n° 7, p. 1259-1262, juill. 2010, doi: 10.1016/j.solmat.2010.03.020.

- [138] S. Silvestre, L. Sentis, et L. Castaner, « A fast low-cost solar cell spectral response measurement system with accuracy indicator », IEEE Trans. Instrum. Meas., vol. 48, n° 5, p. 944-948, oct. 1999, doi: 10.1109/19.799652.
- [139] W. Stuart R, G. Martin A, W. Muriel E, et C. Richard, Applied Photovoltaics, 2nd ed. Earthscan, 2007.

## PUBLICATIONS ET COMMUNICATIONS

---

### *Publications*

1. Chahrazad Boudaoud, Abdelkader Hamdoune, Zehor Allam, “Simulation and optimization of a tandem solar cell based on InGaN”; Journal of Mathematics and Computers in Simulation ; Received 13 February 2018, Revised 15 August 2018, Accepted 4 September 2018, Available online 15 September 2018, Volume 167 (January 2020), pp. 194–201. ISSN: 0378-4754  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378475418302179?via%3Dihub>  
<https://doi.org/10.1016/j.matcom.2018.09.007>
2. Chahrazad Boudaoud, Abdelkader Hamdoune, Zehor Allam, Simulation of p-GaN/ i-InGaN/n-GaN solar cell [2014 North African Workshop on Dielectric Materials for Photovoltaic Systems \(NAWDMPV\)](#), IEEE, [10.1109/NAWDMPV.2014.6997614](https://doi.org/10.1109/NAWDMPV.2014.6997614)
3. Zehor Allam, Abdelkader Hamdoune, Chahrazad Boudaoud, High-Performance Solar-Blind Photodetector Based on AlGaIn/GaN Heterostructure, [2014 North African Workshop on Dielectric Materials for Photovoltaic Systems \(NAWDMPV\)](#), IEEE, [10.1109/NAWDMPV.2014.6997616](https://doi.org/10.1109/NAWDMPV.2014.6997616)
4. A. Hamdoune, Z. Allam, C. Boudaoud, Performance of an InGaIn/GaN/AlGaIn MSM photodetector, OPTOELECTRONICS AND ADVANCED MATERIALS, Vol. 8, No. 1-2, January - February 2014, p. 33 – 36. <https://oam-rc.inoe.ro/articles/performance-of-an-inganganal-gan-msm-photodetector/>
5. Zehor Allam, Abdelkader Hamdoune, Chahrazad Boudaoud , [The electrical properties of InGaIn/GaN/AlN MSM photodetector with Au contact electrodes](#) , Journal of Electron Devices, Vol. 17, 2013, pp. 1476-1485 . [http://www.jeldev.org/17\\_Allam.pdf](http://www.jeldev.org/17_Allam.pdf)

### *Communications*

1. Chahrazad Boudaoud\*, Abdelkader Hamdoune, Zehor Allam, Simulation of P-GaN/i-InGaIn/n-GaN solar cell. NAWDMPV’14, 26-27 octobre 2014, Tlemcen, Algeria.
2. Zehor Allam, Abdelkader Hamdoune, Chahrazad Boudaoud, Aicha SOUFI, High-Performance Solar-Blind Photodetector Basedon AlGaIn/GaN Heterostructure. NAWDMPV’14, 26-27 october 2014, Tlemcen, Algeria.

3. Zehor ALLAM, Abdelkader HAMDOUNE, Chahrazed BOUDAOU, Zakia NAKOUL, Aicha SOUFI, High UV Visible of AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub>/AlN MSM Photodetector. ICTA'14, April 23-24, 2014, Béjaia, Algeria.
4. Chahrazed Boudaoud\*, Abdelkader Hamdoune, Zehor Allam, Solar cell based on InGa<sub>N</sub>. International Conference on Telecommunication and Applications. April 23-24, 2014, Bejaia, Algeria.
5. Zehor Allam, Chahrazed Boudaoud and Asmaa Amrani, The simulation of electrical properties and spectral responsivity of InGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub> MSM Photodetector with ATLAS, International conference on Electrical Engineering, November 17-19, 2013, Bechar, Algeria.
6. Chahrazed Boudaoud\*, Abdelkader Hamdoune, Zehor Allam, InGa<sub>N</sub>-based double junction solar cell, International Conference on Power Electronics and Their Applications ICPEA'13, November 6-7, 2013, Djelfa, Algeria.
7. Zehor Allam, Abdelkader Hamdoune, Chahrazed Boudaoud, Performance Of An Algan/Gan/Aln Uv Photodetector, The 2<sup>nd</sup> International Conférence on Electronics and Oil (ICEO'13 ): From Theory to Applications, March 05 - 06, 2013, Ouargla, Algeria.

## Simulation and optimization of a tandem solar cell based on InGaN.

CHAHRAZAD BOUDAUD

*Department of Physics, Faculty of Science, University of Abou-bekr Belkaid, PO Box 119, 13000, Tlemcen, Algeria*  
*chahrazed.boudaoud@yahoo.fr*

ABDELKADER HAMDOUNE

*Materials and Renewable Energy Research Unit, PO Box 119, 13000, Tlemcen, Algeria*  
*ahamdoune@gmail.com*

ZEHOR ALLAM

*Materials and Renewable Energy Research Unit, PO Box 119, 13000, Tlemcen, Algeria*  
*zh1344@yahoo.fr*

The present paper indicates a numerical simulation to optimize the photovoltaic characteristics of an InGaN tandem solar cell. The cell is composed of two sub-cells p-In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/i-In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/n-In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N with indium fraction (x) of 0.05 and 0.15, using sun AM1.5 illumination and SILVACO software for the simulation. The results show that there is an increase in the conversion efficiency compared to that of single-junction p-In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/i-In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/n-In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N cells. We have also simulated the effect of p-doping in the top-cell, the indium composition, and the intrinsic layer thickness; on the characteristics of the tandem solar cell. We have reached a conversion efficiency of 3.71% for an intrinsic layers thickness of 0.1 μm and p-doping of 10<sup>18</sup> cm<sup>-3</sup> in the top cell.

*Keywords:* GaN; InN; InGaN; Tandem solar cells.

### Introduction

The tunable band gap of InGaN varies from 0.65 eV to 3.42 eV matching well with the energy of the solar spectrum, is the most property which makes it advantageous for high-performance multi-junction solar cells. Several InGaN sub-cells with adjusted indium content can be stacked to form a full-spectrum-response solar cell based on a single material system [1-3]. Furthermore, the InGaN-based systems have many other advantages, such as large absorption coefficient, high carrier mobility, high drift velocity, high temperature, and radiation resistance [4, 5]. Unfortunately, the experimental conversion efficiency of solar cells InGaN is still lower compared it with what expected. The authors in [6, 7] reported a maximum efficiency of about 3.4% for InGaN solar cells. Progress in the field has been limited to devices operating in the violet range with active layers including only 10% -20% of In. To absorb light in the longer wavelength range, we must incorporate In. Although, this leads to degrading the crystalline quality of the InGaN active layer, therefore, reduces the efficiency of the device [8]. Other factors limiting the amelioration of the device characteristics are the poor conductivity of p-type InGaN, the critical thickness limitation of the thick InGaN layer [9], and the mismatch between the two binary, indium nitride and gallium nitride of 10 % [10].

In the present work, we simulate an InGaN tandem solar cell composed of two p-In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/i-In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/n-In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N sub-cells with different indium concentrations. Our purpose is to augment the conversion efficiency of the device.

### Simulation Parameters

We have used SILVACO-Atlas for our simulations; which is a 2D and 3D device simulator. It allows us to numerically solve Poisson’s equation coupled with continuity equations for both electrons and holes under steady-state conditions.

The Energy band gap of the In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N depending on the indium fraction can be approximated using a modified Vegard’s law including the bowing parameter (b) [11], in addition to the linear interpolation; this is given by “Eq. (1)”.

$$E_{In_xGa_{1-x}N} = x \times E_{InN} + (1 - x) \times E_{GaN} - b \times x \times (1 - x). \quad (1)$$

E<sub>GaN</sub> and E<sub>InN</sub> are the values of the emission energy deduced from optical measurements. However, large discrepancies are observed in the published values of b varying in the range 1.4 eV – 2.8 eV “See Refs.11-13”, since the InN band-gap re-evaluation in 2002 [13].

“Equations (2) and (3)” give electron affinity and permittivity of In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N [14].

$$\chi = 3.659 \times x - 2.666x^2 + 4.31. \quad (2)$$

$$\epsilon_r = 15.3 \times x + 8.9 \times (1 - x). \quad (3)$$

The electron mobility (μ<sub>e</sub>) and the hole mobility (μ<sub>h</sub>) are calculated, using “Eq. (4)”.

$$\mu_{e/h}(N) = \mu_{min,e/h} + \frac{\mu_{max,e/h} - \mu_{min,e/h}}{1 + (N/N_{g,e/h})^{\gamma_{e/h}}}. \quad (4)$$

Where N is the doping concentration, μ<sub>min</sub>, μ<sub>max</sub>, are the minimum and the maximum mobility, N<sub>g</sub> is the reference doping level and γ is a specific parameter for a given material [15].

The holes mobility of p-In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N used in simulation was 13 cm<sup>2</sup>/Vs, 2.5 cm<sup>2</sup>/Vs, 3.0 cm<sup>2</sup>/Vs, and 1.8 cm<sup>2</sup>/Vs for indium compositions of 0.05, 0.15, 0.22 and 0.35, respectively [16].

The effective density of states in the conduction and valence bands (N<sub>c</sub>, N<sub>v</sub>) respectively for InN and GaN, were calculated by equations (5) and (6) [17, 18]:

$$N(T)_{C/V,InN} = 4.82 \times 10^{15} \times \left(\frac{m_{h/e}^*}{m_0}\right)^{3/2} \times T^{3/2} \quad (5)$$

$$N(T)_{C/V,GaN} = 2.50945 \times 10^{19} \times \left(\frac{m_{h/e}^*}{m_0}\right)^{3/2} \times T^{3/2} \quad (6)$$

where  $m_{h/e}^*$  is the effective mass of the hole and the electron, and T is the temperature.

Parameters of InGaN, GaN and InN materials used in simulation are given by table 1.

Table 1. Parameters of GaN, InN and InGaN materials, “See Refs.3, 17, and 19.”

	GaN	InN	Interpolation (InGaN)
Eg	3.42	0.65	1.43 bowing
SRH lifetime of electrons (s)	$1.70 \times 10^{-9}$	-	$1.70 \times 10^{-9}$
SRH lifetime of holes (s)	$0.65 \times 10^{-9}$	-	$0.65 \times 10^{-9}$
Electron mass $m_e/m_0$	0.2	0.05	-
Hole mass $m_h/m_0$	1.25	0.36	-
$\mu_{\min,e}$ ( $\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ )	55	30	Linear
$\mu_{\max,e}$ ( $\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ )	1000	1100	Linear
$\gamma_e$	1	1	Linear
$N_{g,e}$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$2 \times 10^{17}$	$8 \times 10^{18}$	Linear
$\mu_{\min,h}$ ( $\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ )	3	3	Linear
$\mu_{\max,h}$ ( $\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ )	170	340	Linear
$\gamma_h$	2	2	Linear
$N_{g,h}$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$3 \times 10^{17}$	$3 \times 10^{17}$	Linear

### Results and Discussion

We have chosen the cell studied by Liwen Sang et al.[20] as structure of basis of sub-cells; the layers properties of sub-cells are: n- $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  layer with thickness of 150 nm and a doping of  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , i- $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  layer with thickness of 240 nm, p- $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  layer with thickness of 90 nm and a doping of  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ , and p-GaN layer with thickness of 15 nm and a doping of  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ .

The characteristics of the p-i-n/ InGaN photovoltaic (PV) devices were simulated using one sun AM1.5 illumination. Firstly, we have studied the variation of the sub-cell current density J (V) for different indium contents. Results are illustrated in figure 1. When the indium content increase, the  $V_{OC}$  decreases; as already explained [8], this reduction due to high leakage currents results from high-concentration (> 20%) of indium.

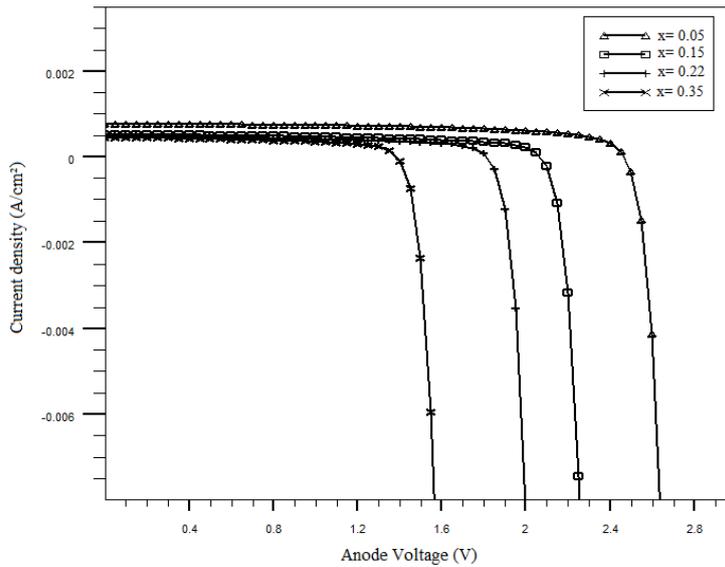


Fig.1. Current-voltage (J-V) of the sub-cell as a function of In composition.

The results obtained for an indium fraction of 15% are near to those found by Liwen Sang et al. [20] Table 2 recapitulates the simulation results.

Table.2. Details of sub-cell performances for different indium contents.

	x	J <sub>SC</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	V <sub>OC</sub> (V)	FF (%)	η (%)
Our results	0.05	0.77	2.46	64.61	1.22
	<b>0.15</b>	<b>0.52</b>	<b>2.06</b>	<b>57.90</b>	<b>0.62</b>
	0.22	0.50	1.80	56.84	0.52
	0.35	0.50	1.37	59.31	0.41
Liwen Sang et al. <sup>20</sup>	<b>0.15</b>	<b>0.77</b>	<b>1.31</b>	<b>55</b>	<b>0.55</b>

Figure 2 presents the structure of the InGaN-based tandem solar cell studied in this work; it is formed by two p-In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/i-In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/n-In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N sub-cells. The two sub-cells are separated by an In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N tunnel junction.

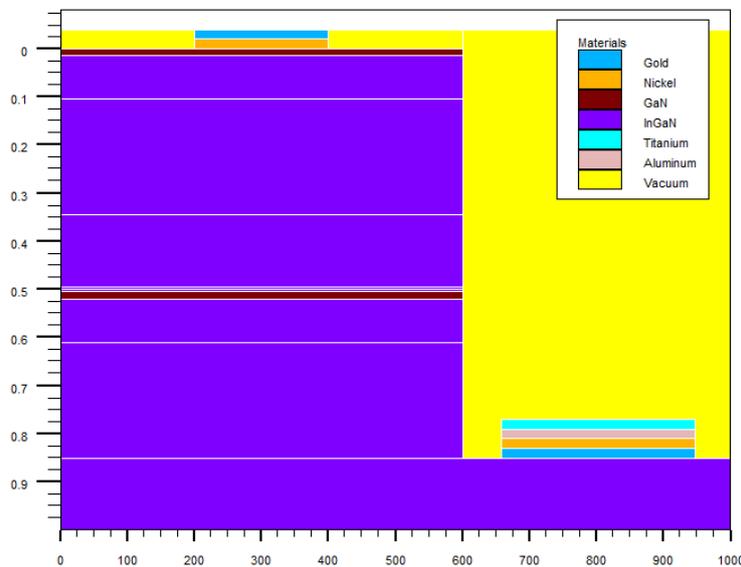


Fig. 2. Schematic structure of the tandem solar cell.

We started by studying all possible tandem cells with indium concentrations of 0.05, 0.15, 0.22, and 0.35. Table 3 gives the details of the different simulated solar cells, and figure 3 recapitulates the results obtained for the short circuit current density (J<sub>SC</sub>), the open circuit voltage (V<sub>OC</sub>), and the efficiency (η). The tandem solar cell of indium concentration of 0.05 and 0.15 for the top Sub-cell and the bottom Sub-cell respectively; gives better results, so we have chosen it to continue our study.

Table 3. Tandem solar cells simulated.

Tandem solar cells	Cell#1		Cell#2		Cell#3		Cell#4		Cell#5		Cell#6	
Sub-cells	Top-cell	Bottom-cell										
x-composition	0.05	0.15	0.05	0.22	0.05	0.35	0.15	0.22	0.15	0.35	0.22	0.35

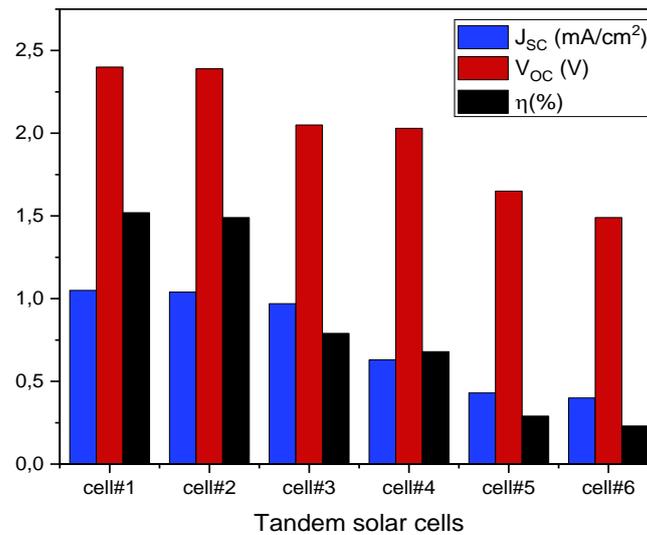


Fig.3. Jsc, Voc, and η of different tandem solar cells.

Figure 4 represents the J-V characteristic of the tandem cell (p-In<sub>0.05</sub>Ga<sub>0.95</sub>N/i-In<sub>0.05</sub>Ga<sub>0.95</sub>N/n-In<sub>0.05</sub>Ga<sub>0.95</sub>N/ p-In<sub>0.15</sub>Ga<sub>0.85</sub>N/i-In<sub>0.15</sub>Ga<sub>0.85</sub>N/n-In<sub>0.15</sub>Ga<sub>0.85</sub>N), the top-cell, and the bottom cell. As it is noted in the figure, J<sub>SC</sub> of the tandem cell is superior to the J<sub>SC</sub> of the two sub-cells, while the V<sub>OC</sub> is inferior to the V<sub>OC</sub> of the top cell. For the tandem cell, a short circuit current density of 1.05 mA/cm<sup>2</sup>, and an open circuit voltage of 2.40 V are obtained; all results are given by Table 4.

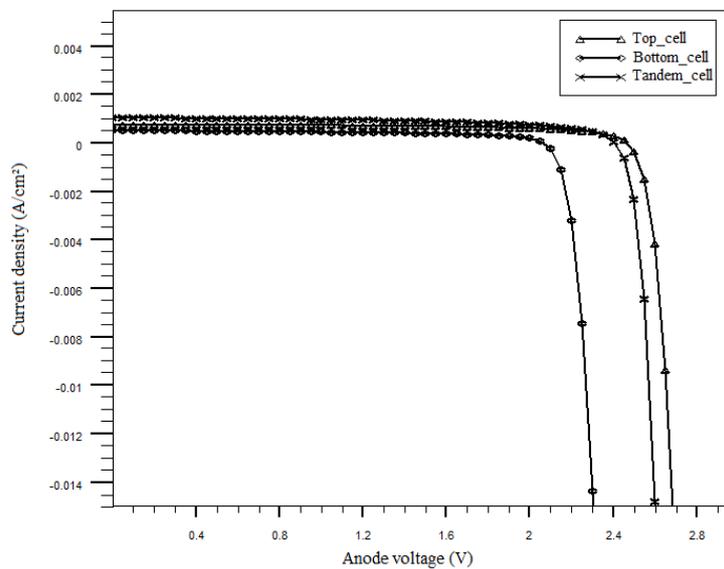


Fig. 4. Current-voltage (J-V) of the tandem solar cell, and the two sub-cells.

Table 4. Details of the simulation results for the three cells.

	J <sub>sc</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	V <sub>oc</sub> (V)	FF (%)	η (%)
Top-cell	0.77	2.46	64.61	1.22
Bottom-cell	0.52	2.06	57.90	0.62
Tandem-cell	1.05	2.40	60.34	1.52

The photovoltaic characteristics are calculated using the equations (7), (8), (9), and (10), “See Refs. 21–22.”

Eq. (7) gives the current–voltage function (J) of the PV device.

$$J = J_s(e^{qV/nkT} - 1) - J_{sc}. \tag{7}$$

From Eq. (7), when J=0, the open-circuit voltage can be defined as:

$$V_{oc} = \frac{nKT}{q} \ln\left(\frac{J_{sc}}{J_s} + 1\right). \tag{8}$$

Where  $J_s$  is the reverse saturation current density,  $n$  is the ideality factor,  $KT/q$  is the thermal voltage, and  $V$  is the bias voltage.

The energy conversion efficiency is given by :

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_{in}} = \frac{J_{max}V_{max}}{P_{in}} = \frac{FFJ_{sc}V_{oc}}{P_{in}}. \tag{9}$$

$P_{in} = 1000 \text{ Wm}^{-2}$ , that is the input power from the sunlight for 1-sun under AM1.5 condition, FF is fill factor of solar cell, which is expressed as:

$$FF = \frac{J_{max}V_{max}}{J_{sc}V_{oc}}. \tag{10}$$

In the following study, we have optimized the p-type doping in the top cell and the thickness of the intrinsic layer in the two sub-cells of the device, to improve the performances of the device.

Figure 5 shows the effect of p-type doping in the top cell on  $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ ,  $\eta$ , and FF of the tandem cell. The efficiency of the cell attains a maximum value of 3.65% for doping equal to  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . The  $J_{sc}$  increases with the p-doping; this increase is significant when the p-doping changes from  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  to  $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  and in higher value from  $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ , the  $J_{sc}$  decreasing lightly. A maximum value of the  $V_{oc}$  obtained for a p-doping of  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .

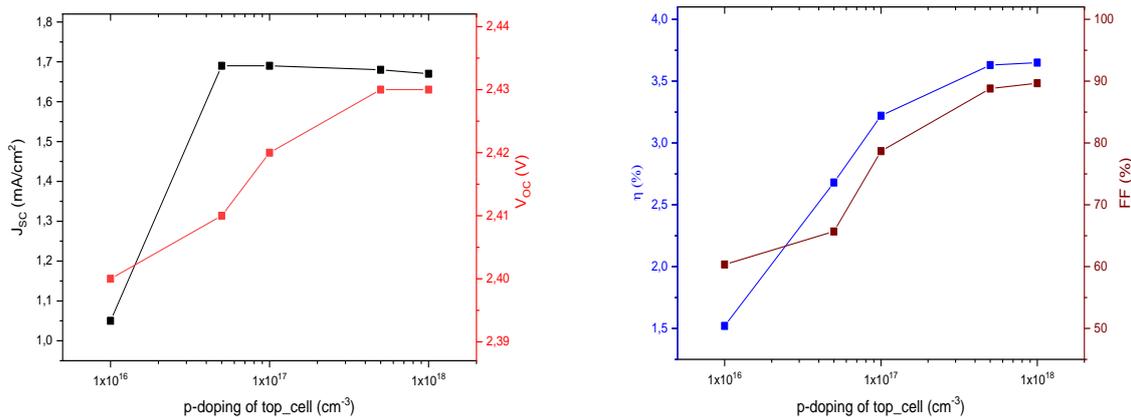


Fig.5. Effect of p-doping in the top cell on the photovoltaic characteristics ( $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ ,  $\eta$ , and FF) of the tandem solar cell.

Figure 6 shows the evolution of  $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ ,  $\eta$ , and FF as a function of intrinsic layers thickness with p-doping of  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  in the two sub-cells; and a p-doping of  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  and  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  in the top-cell and the bottom-cell respectively. Tandem cell gives a better efficiency of 3.71%

for a thickness of 0.1  $\mu\text{m}$  and an optimized p-doping of the top-cell of  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . As it is shown in the figure,  $J_{sc}$  improves with intrinsic layers thickness while thick intrinsic layers led to reduce  $V_{oc}$ .

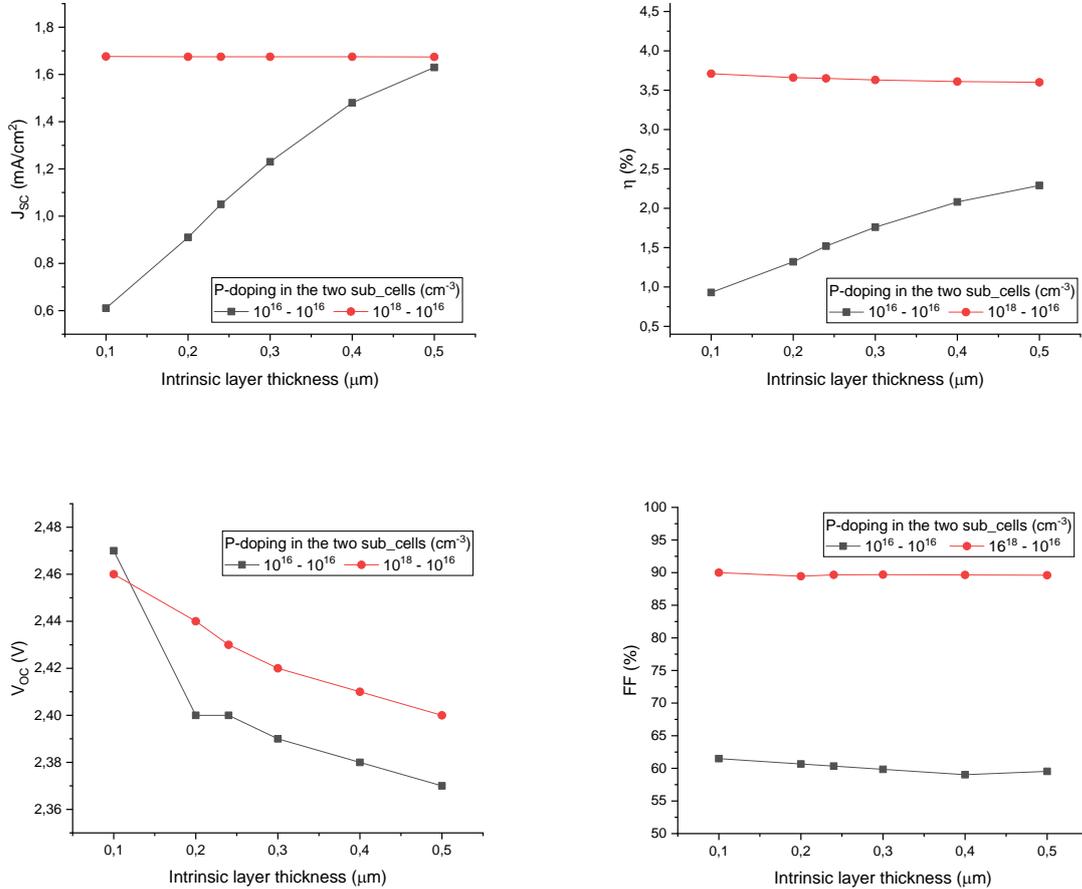


Fig.6. Variation of the photovoltaic characteristics of the tandem cell with various i-region thicknesses.

Simulated external quantum efficiency ( $EQE$ ) for the optimized tandem solar cell is given by figure 7, with a p-doping of  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  in the top-cell and a p-doping of  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  in the bottom-cell. We have attained a maximum  $EQE$  of about 10% at a wavelength of 300 nm.

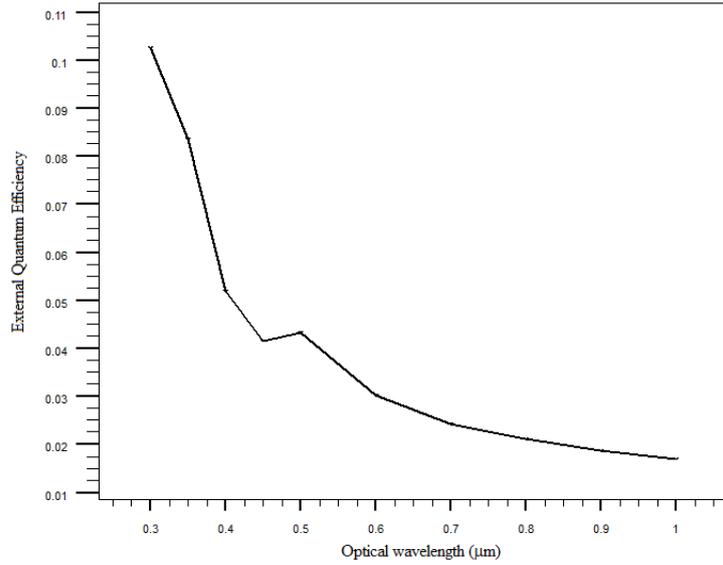


Fig.7. External quantum efficiency of the tandem solar cell.

Spectral response, defined as the ratio of the photogenerated short-circuit current ( $I_{sc}$ ) to the incident luminous power ( $P_{in}$ ) upon the PV cell, is an intrinsic parameter for the specific cell in the course of the photovoltaic conversion [23]. The spectral response ( $SR$ ) is expressed as [24]:

$$SR(\lambda) = \frac{I_{sc}(\lambda)}{P_{in}(\lambda)} \quad (11)$$

The  $SR$  can be related to the external quantum efficiency by [25]:

$$SR(\lambda) = 0.808 \times \lambda \times EQE(\lambda) \quad (12)$$

where  $\lambda$  is the photon wavelength, and  $EQE$  is external quantum efficiency.

Figure 8 presents the spectral response of our device with a p-doping of  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  in the top-cell and  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  in the bottom-cell. We obtain a maximum cathode current density of about  $0.026 \text{ A/cm}^2$  for an optical wavelength of 500 nm.

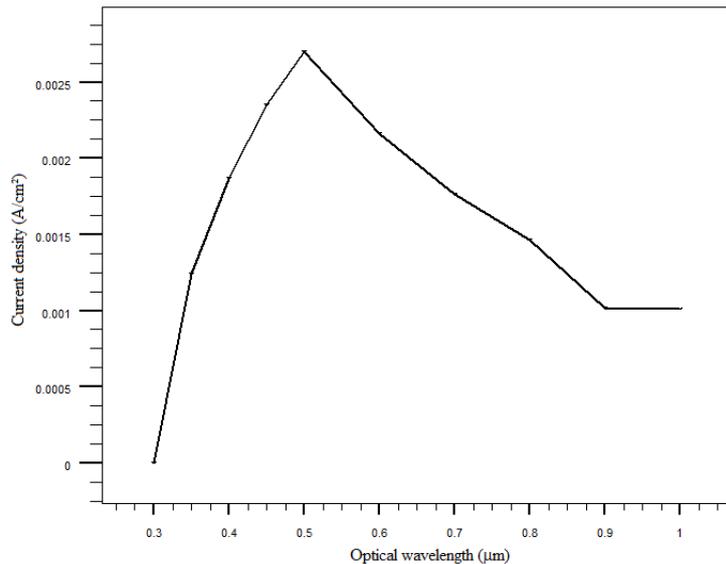


Fig. 8. Spectral response of the tandem solar cell.

## Conclusion

The performances of an InGa<sub>x</sub>N tandem solar cell were simulated using SILVACO software. This cell was formed by two p-In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/i-In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/n-In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N sub-cells with indium concentration of 0.05 and 0.15, using 1-sun AM1.5 illumination. J-V characteristics of sub-cell for different indium composition and the effect of intrinsic layer thickness and p-doping of top-cell on the tandem solar cell characteristic were performed. We have noted that  $J_{SC}$ ,  $V_{OC}$ , and  $\eta$ , increase with the decrease of  $x$ , and  $J_{SC}$  improves with intrinsic layers thickness while thick intrinsic layers led to reducing  $V_{OC}$ . According to the numerical simulations performed, we attained the best results for a thickness of the intrinsic layer of 0.1  $\mu\text{m}$  and a p-doping of  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  and  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  of the active layers of the top-cell and the bottom-cell, respectively.

The spectral response and external quantum efficiency of the optimized tandem solar cell were simulated; maximum  $EQE$  of 10% was obtained at a wavelength of 300 nm.

## References

- [1] G.F. Brown, J.W. Ager, W. Walukiewicz, J. Wu, Sol. Energy Mater. Sol. Cells 94 (2010) 478–483.
- [2] Z. Chen, X. Zheng, Z. Li, P.Wang, X. Rong, T.Wang, X. Yang, F. Xu, Z. Qin, W. Ge, B. Shen, X.Wang, Appl. Phys. Lett. 109 (2016) 062104.
- [3] R. Dahal, J. Li, K. Aryal, J.Y. Lin, H.X. Jianga, Appl. Phys. Lett. 97 (2010) 073115.
- [4] C.A.M. Fabien, W.A. Doolittle, Sol. Energy Mater. Sol. Cells 130 (2014) 354–363.
- [5] S.W. Feng, C.M. Lai, C.H. Chen, W.C. Sun, L.W. Tu, J. Appl. Phys. 108 (2010) 093118.
- [6] V. Gorge, A. Migan, Z. Djebbour, K. Pantzas, S. Gautier, T. Moudakir, S. Suresh, A. Ougazzaden, Mater. Sci. Eng. B178 (2013) 142–148.
- [7] M.R. Islam, M.R. Kaysir, M.J. Islam, A. Hashimoto, A. Yamamoto, J. Mater. Sci. Technol. 29 (2) (2013) 128–136.
- [8] S. Lin, B.P. Zhang, S.W. Zeng, X.M. Cai, J.Y. Zhang, S.X. Wu, A.K. Ling, G.E. Weng, Solid-State Electron. 63 (2011) 105–109.
- [9] L. Lui, N. Chen, Y. Wang, Y. Bai, M. Cui, F. Gao, Chinese Science Bulletin 54 (3) (2009) 353–357.
- [10] T. Markvart, L. Castaner, McEvoy's handbook of Photovoltaics, in: Fundamentals and Applications, third ed., Elsevier, 2017, pp. 3–28.
- [11] D.V.P. Mc Laughlin, J.M. Pearce, Mater. Sci. Eng. B177 (2012) 239–244.

- [12] M. Nazaz, A. Ahmad, *Semicond. Sci. Technol.* 27 (2012) 035019.
- [13] G. Orsal, Y. El Gmili, N. Fressengeas, J. Streque, R. Djerboub, T. Moudakir, S. Sundaram, A. Ougazzaden, J.P. Salvestrini, *Opt. Soc. Am.* (2014), OCIS codes: (310.6860).
- [14] B.N. Pantha, A. Sedhain, J. Li, J.Y. Lin, H.X. Jiang, *Appl. Phys. Lett.* 95 (2009) 261904.
- [15] G. Sabui, P.J. Parbrook, M. Arredondo-Arechavala, Z.J. Shen, *Aip Adv.* 6 (2016) 055006.
- [16] L. Sang, M. Liao, N. Ikeda, Y. Koide, M. Sumiya, *Appl. Phys. Lett.* 99 (2011) 161109.
- [17] K. Wang, D. Imai, K. Kusakabe, A. Yoshikawa, *Appl. Phys. Lett.* 108 (2016) 092105.
- [18] J. Wei Ho, L. Zhang, Q. Wee, A.O. Tay, M. Heuken, S.J. Chua, *J. Cryst. Growth* 383 (2013) 1–8.
- [19] S.R. Wenham, M.A. Green, M.E. Watt, R. Corkish, *Applied Photovoltaics*, Earthscan, London, UK, 2012.
- [20] J. Wu, *J. Appl. Phys.* 106 (2009) 011101.
- [21] M.H. Wu, S.Po. Chang, W.Y. Liao, M.T. Chu, S.J. Chang, *Surf. Coat. Technol.* 231 (2013) 253–256.
- [22] J. Wu, W. Walukiewicz, K.M. Yu, J.W. Ager, E.E. Haller, H. Lu, W.J. Schaff, *Appl. Phys. Lett.* 80 (2002) 4741–4743.
- [23] L.M. Yang, C.Y. Pan, F.P. Lu, C.W. Chang, S.W. Feng, L.W. Tu, *Opt. Laser Technol.* 67 (2015) 72–77.
- [24] N.G. Young, E.E. Perl, R.M. Farrell, M. Iza, S. Keller, J.E. Bowers, S. Nakamura, S.P. DenBaars, J.S. Speck, *Appl. Phys. Lett.* 104 (2014) 163902.
- [25] S. Zeng, X. Cai, B. Zhang, *IEEE J. Quantum Electron.* 46 (5) (2010).

## Résumé

L'alliage InGaN prend une grande importance aux applications photovoltaïques grâce à sa large bande interdite qui varie de 0.65 eV (gap d'InN) à 3.43 eV (gap de GaN), permettant l'absorption d'une grande partie du spectre solaire et la fabrication de cellules solaires multijonctions à haut rendement. Dans ce travail de thèse, nous avons étudié par simulation une structure tandem d'une cellule solaire à base d'InGaN. La structure est composée de deux sous cellules à homojonction de type p-i-n. L'objectif de l'étude est d'optimiser les performances de la cellule ; à cet effet nous avons utilisé le logiciel Atlas de SILVACO. Nous avons commencé par faire varier l'épaisseur des couches ainsi que le dopage des couches. Des valeurs optimales sont obtenues pour ces deux paramètres. Ensuite, nous avons étudié l'effet de la température sur les performances de la structure, nous avons obtenu de bons résultats pour les basses températures. Enfin, pour optimiser encore les performances de la cellule tandem étudiée nous avons ajouté une couche antireflet à la surface de la cellule. Le rendement réalisé par cette étude de simulation est passé de 1.52 % pour la structure de base à 8.43 % après optimisation des paramètres de la cellule solaire tandem.

**Mots-clés :** InGaN; Cellules solaires tandem; Photovoltaïque ; Atlas/SILVACO ; Optimisation; Simulation.

## Abstract

InGaN alloy takes great importance in photovoltaic applications due to its wide bandgap which extends from 0.65 eV (InN gap) to 3.43 eV (GaN gap), allowing the absorption of a large part of the solar spectrum and the fabrication of high-efficiency multi-junction solar cells. In this thesis, we studied a tandem structure of an InGaN-based solar cell by simulation. The structure consists of two p-i-n homojunction sub-cells. The objective of the study is to optimize the performances of the cell; for this purpose, we used the Atlas software of SILVACO. We started by varying thickness of layers as well as the doping of the layers. Optimal values are obtained for these two parameters. Then, we studied the effect of temperature on the performance of the structure; we got good results for low temperatures. Finally, to further optimize the performance of the studied tandem cell, we added an antireflection layer to the cell surface. The efficiency achieved by this simulation study is increased from 1.52% for the basic structure to 8.43% after optimization of the tandem solar cell parameters.

**Keywords:** InGaN; Tandem Solar cells; Photovoltaic; Atlas/SILVACO; Optimization; Simulation.

## ملخص

تكتسب سبائك InGaN أهمية كبيرة في التطبيقات الكهروضوئية بفضل نطاقها المحطور الواسع الذي يتراوح من 0.65 eV (فجوة InN) إلى 3.43 eV (فجوة GaN)، مما يسمح بامتصاص جزء كبير من الطيف الشمسي وتصنيع خلايا شمسية عالية الأداء متعددة الوصلات. من خلال هذا العمل، درسنا عن طريق محاكاة هيكل ترادفي لخلايا شمسية يعتمد على InGaN. يتكون الهيكل من خليتين فرعيتين متماتلتين من نوع p-i-n. الهدف من الدراسة هو تحسين أداء الخلية، للقيام بذلك استخدمنا برنامج Atlas من SILVACO. في البداية، قمنا بتغيير سمك الطبقات و أيضاً منشطات الطبقات. تم الحصول على القيم المثلى لهاتين الخاصيتين. بعد ذلك، درسنا تأثير درجة الحرارة على أداء الهيكل، وقد حصلنا على نتائج جيدة لدرجات الحرارة المنخفضة. أخيراً، لزيادة تحسين أداء الخلية الترادفية التي تم دراستها، أضفنا طبقة مضادة للانعكاس على سطح الخلية. حققت دراسة المحاكاة التي قمنا بها ارتفاعاً للكفاءة من 1.52% للهيكل الأساسي إلى 8.43% بعد تحسين خصائص الخلية الشمسية الترادفية.

**الكلمات المفتاحية :** نيتريد الغاليوم الإنديوم (InGaN)، خلايا شمسية ترادفية، كهروضوئية، Atlas/SILVACO، تحسين، محاكاة.