



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID - TLEMCEM

THÈSE

Présentée à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

DOCTORAT EN SCIENCES

Spécialité: Physique Energétique

Par :

Mlle BOUKAIS Meriem

Sur le thème

Utilisation des couches minces à base des matériaux IV-IV dans les applications photovoltaïques

Soutenue publiquement le 15/03/2022 à Tlemcen devant le jury composé de :

Mr CHABANE-SARI Nesr eddine	Professeur	Université de Tlemcen	Président
Mme OULD ABBAS Amaria	Professeur	Université de Tlemcen	Directeur de thèse
Mr DENNAI Benmoussa	Professeur	Université de Béchar	Co-Directeur de thèse
Mme GHELLAI Nacera	Professeur	Université de Tlemcen	Examineur
Mr KHACHAB Hamid	Professeur	Université de Béchar	Examineur
Mr ATTOUANI Taoufik	MCA	Université de Béchar	Examineur

*Unité de recherche matériaux et énergies renouvelables (URMER)
BP 119, 13000 Tlemcen - Algérie*

Dédicaces

À l'âme de mes grands-parents et ma chère sœur « Fouzia » que dieu les accueille dans son
vaste paradis

À mon cher grand père que Dieu le protège

À mes chers parents, pour tous leurs sacrifices, leur amour, leur tendresse, leur soutien et
leurs prières tout au long de mes études,

À mes frères "Abdelaziz et amar"

À mes sœurs "Djamila, Souad, Hassiba et Rabha"

À Mohammed le mari de ma sœur Hassiba, et leurs enfants Loubna et Aissa.

A tous ceux qui me sont chers

M.BOUKAIS

Remerciements

Je remercie en premier lieu Allah le tout puissant pour la volonté, la force, la santé et la patience qu'il m'a donné pour accomplir ce travail

Ce travail de thèse a été effectué au sein l'Unité de Recherche des Matériaux et Energies Renouvelables de l'Université Abou Bekr Belkaïd Tlemcen (URMER) sous la direction de monsieur **S. AMARA** professeur à l'université de Tlemcen. Je tiens à le remercie pour m'avoir accueilli dans d'excellentes condition.

J'adresse mes profonds remerciements à mon encadreur, Madame **A. OULD ABBAS**, Professeur à l'Université de Tlemcen, pour m'avoir donné l'opportunité de réaliser cette thèse, pour ses encouragements, sa disponibilité et son attention.

Je tiens aussi à exprimer ma profonde gratitude au Monsieur **B. DENNAI**, Professeur à l'université de Bechar pour avoir dirigé ce travail dans un esprit de confiance et pour son aide et son soutien.

J'exprime mes sincères remerciements à Monsieur **NE. CHABANE-SARI**, Professeur à l'université de Tlemcen, d'avoir accepté de présider le jury de cette thèse.

Je remercie vivement Madame **N. GHELLAI**, Professeur à l'université de Tlemcen, d'avoir accepté d'examiner le présent travail.

Je tiens à remercier Monsieur **H. KHACHABE**, Professeur à l'université de Bechar, d'avoir accepté d'examiner le présent travail.

Je remercie également Monsieur **T. ATOUANI**, Maître de conférences à l'université de Bechar, d'avoir accepté de faire partie du jury de ma thèse.

Enfin, je tiens à remercier tous mes enseignants du primaire à l'universitaire, en passant par le moyen et le secondaire qui m'ont donné l'éducation et les enseignements adéquats pour aboutir au Doctorat.

Résumé:

Au cours des 20 dernières années, il y a eu un intérêt croissant pour les énergies renouvelables et naturelles comme le soleil. Leur principal avantage est qu'il est disponible en permanence pour l'homme. L'une des énergies les plus utilisées est l'énergie solaire photovoltaïque. L'industrie photovoltaïque actuelle utilise le silicium comme matériau de base, deuxième élément sur terre en abondance sous forme de sable. Malgré tous les efforts déployés pour développer le domaine photovoltaïque, les volumes de production sont restés toujours insuffisants. De ce fait l'industrie photovoltaïque doit encore multiplier ses capacités et réduire son coût du kWh. Ceci doit forcément passer par une amélioration du rendement des cellules solaires et une diminution de leur coût de production. Les couches minces présentent des avantages économiques certains dans la production de modules solaire à grand échelle et à rendement important. Les choix se tournent vers des matériaux à fort coefficient d'absorption où les épaisseurs requises seront de l'ordre du μm . Dans cette étude on porte sur la faisabilité d'application de l'alliage SiGe et du silicium poreux (SiP) et de leur intégration dans les cellules solaires à couches minces. L'intérêt permet d'accroître le photocourant grâce à une plus grande absorption dans l'Infra Rouge (IR). Le SiP sert de couche antireflet et de passivation de l'émetteur de la cellule.

Mots clés : SiGe, Silicium Poreux (SiP), cellule solaire...

Summary:

In the last 20 years there has been a growing interest in renewable and natural energies like the sun. Their main advantage is that they are permanently available to mankind. One of the most used energies is the solar photovoltaic energy. The current photovoltaic industry uses silicon as the basic material, the second most abundant element on earth in the form of sand. Despite all the efforts to develop the photovoltaic field, the production volumes have always remained insufficient. Therefore, the photovoltaic industry still needs to increase its capacity and reduce its cost per kWh. This must be done by improving the efficiency of solar cells and reducing their production costs. Thin films have economic advantages in the production of large-scale solar modules with high efficiency. The choices are turned towards materials with high absorption coefficient where the required thicknesses will be of the order of μm . In this study, the feasibility of the application of SiGe alloy and porous silicon (SiP) and their integration in thin film solar cells is investigated. The interest is to increase the photocurrent through to a greater absorption in the Infra Red (IR). SiP is used as an anti-reflection layer and as a passivation layer for the emitter of the cell.

Keywords: SiGe, Porous Silicon (SiP), solar cell

ملخص:

على مدار العشرين عامًا الماضية، كان هناك اهتمام متزايد بالطاقات المتجددة والطبيعية مثل الشمس. الميزة الرئيسية المتاحة للإنسان هي أن الطاقة الشمسية غالبًا ما تكون الأكثر استخدامًا. تستخدم الصناعة الكهروضوئية الحالية السيليكون كمادة أساسية ، وهو ثاني أكثر العناصر وفرة على وجه الأرض في شكل رمل. على الرغم من كل الجهود المبذولة لتطوير قطاع الطاقة الكهروضوئية ، ظلت أحجام الإنتاج دائمًا غير كافية. نتيجة لذلك ، يجب على صناعة الخلايا الكهروضوئية مضاعفة قدراتها وتقليل تكلفتها لكل كيلو وات ساعة. يجب أن يمر هذا بالضرورة من خلال تحسين كفاءة الخلايا الشمسية وخفض تكلفة إنتاجها. تتمتع الطبقات الرقيقة بمزايا اقتصادية محددة في إنتاج وحدات شمسية كبيرة الحجم وعالية الكفاءة. تتحول الاختيارات إلى مواد ذات معامل امتصاص مرتفع حيث تكون السماكة المطلوبة من رتبة ميكرومتر. في هذه الدراسة ، نركز على جدوى تطبيق سبائك SiGe والسيليكون المسامي (SiP) ودمجها في الخلايا الشمسية المصنوعة من السليكون الرقيق. الهدف من استعمال هذه السبائك رفع التيار الكهروضوئي عن طريق زيادة الامتصاص في طيف الأشعة تحت الحمراء. يعمل SiP كطبقة مضادة للانعكاس والتخميل لباعث الخلية .

الكلمات المفتاحية : سيليسيوم -جيرمانيوم ، سيليكون مسامي ، خلية شمسية

Liste des figures

Figure 1.1: Les débuts du photovoltaïque : (a) Expérience électrochimique de A.E. Becquerel, (b) La première cellule solaire d'Adams et Day [1]	7
Figure 1.2: Les inventeurs de la première cellule solaire "réelle": Chapin, Fuller et Pearson. La figure à droite montre le premier module solaire au monde (mini module de 8 cellules solaires) [1]	8
Figure 1.3: Evolution des rendements de conversion de chaque filière de cellules photovoltaïques [6]	9
Figure 1.4: Représentation des spectres solaires AM0 et AM1,5G [8]	11
Figure 1.5 : Les types de recombinaison dans un semiconducteur a) bande à bande b) Auger c) Shockley Read Hall	14
Figure 1.6: Transitions inter-bandes d'électrons dans un semi-conducteur. Le cas a) correspond à un semi-conducteur à gap direct, le cas b) à un gap indirect..	15
Figure 1.7: Structure (image gauche) et diagramme de bande (image droite) d'une cellule photovoltaïque. Les dimensions respectives des différentes zones ne sont pas respectées.	17
Figure 1.8 : Caractéristiques $I=f(V)$ sous obscurité et sous éclairage d'une cellule photovoltaïque.	17
Figure 1.9: Schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque idéale à jonction PN	18
Figure 1.10: Schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque réelle.	19
Figure 1.11 : Le facteur de forme dans la courbe $I(V)$ [23]	21
Figure 1.12 : Courbe explicatif du rendement quantique du silicium [26]	23
Figure 1.13 : Courbe de l'irradiance solaire en fonction de la longueur d'onde.	24
Figure 1.14: Processus de fabrication de panneaux photovoltaïques (CZ : Czochralski).	27
Figure 1.15 : Répartition (%) de la production de cellules par filière en 2015 [38]	27
Figure 1.16: Composition d'une cellule photovoltaïque [50]	32
Figure 1.17: Cellule solaire à haut rendement PERL [55]	34
Figure 2.1 : Structure cristallin de type diamant (Si, Ge, C, ...).	44
Figure 2.2 : Largeur de bande interdite et longueur d'onde optique maximale d'absorption en fonction du paramètre de maille pour différents composés et alliages semiconducteurs. La bande interdite du SiGe contraint est annotée par la mention (SLE).	45

Figure 2.3 : Evolution du paramètre de maille a du $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ en fonction de la concentration x en germanium. Les cercles sont les données mesurées, [3]	46
Figure 2.4: Représentation 2D des deux types de croissance possibles : (a) Croissance pseudomorphique, avec contrainte biaxiale dans le plan de l'interface ; (b) Croissance relaxée, des dislocations apparaissent dans le plan de l'interface.	48
Figure 2.5 : Espace de stabilité des films SiGe déposés sur substrat Si indiquant les courbes d'épaisseurs limites en fonction de la composition pour les états stables et métastables [8]	49
Figure 2.6: Epitaxie d'un film en désaccord de maille avec le substrat cubique. Une épaisseur h plus faible que l'épaisseur critique h_c conduit à un film contraint pseudomorphique (b) alors que dans le cas d'une épaisseur plus importante que h_c , il y a relaxation des contraintes de la couche épitaxiée par génération de dislocations à l'interface (c).	50
Figure 2.7: Diagramme des énergies pour un matériau q est la charge élémentaire, V le potentiel électrostatique pouvant régner dans le matériau, χ l'affinité électronique, ϕ le travail de sortie, et φ le potentiel d'ionisation.	51
Figure 2.8: Schéma du diagramme de bande dans l'espace réciproque à 0 K. La bande de valence est remplie par les électrons et aucun électron ne se trouve dans la bande de conduction	53
Figure 2.9: Structure de bandes de Si et Ge	54
Figure 2.10: Energie de bande interdite d'un alliage $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ contraint et non contraint en fonction de la composition de Germanium [10].	54
Figure 2.11: Conductivité thermique du $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ en fonction de la concentration en germanium	57
Figure 2.12 : Evolution de la température de fusion des alliages $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ en fonction de la teneur en Germanium [2].	58
Figure 2.13 : Indice de réfraction du Si [19].	60
Figure 2.14: Schéma des chemins optiques au niveau d'un dioptre plan	61
Figure 2.15: Coefficient d'absorption des différents semiconducteurs, issu de [27]	63
Figure 2.16: Evolution du spectre d'absorption d'un alliage $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ en fonction de l'énergie des photons incidents et du pourcentage de Si dans l'alliage (1-x).	64
Figure 3.1 : Présentation du programme AMPS 1D [9]	74
Figure. 3.2 : Fenêtre principale (AMPS 1-D)	75

Figure 3.3 : Fenêtre d'informations des couches « layer info».	76
Figure 3.4: Fenêtre d'informations du dispositif : (a) Contact avant, (b) Contact arrière.	77
Figure 3.5: Le spectre solaire AM1.5 utilisé par l'AMPS-1D [10].	78
Figure 3.6 : Organigramme de la structure VWF. [13]	80
Figure 3.7 : Environnement Tonyplot (mesh 2D)	81
Figure 3.8 : Menu de Maskviews	81
Figure.3.9 : Environnement Deckbuild	82
Figure 3.10 : ATLAS entrées et sorties [15]	83
Figure 3.11: Ordre des groupes de commandes fondamentales dans le logiciel ATLAS	84
Figure 4.1 : Le schéma de la cellule simulée à base de SiGe	92
Figure 4.2 : Influence de l'épaisseur de l'émetteur sur le courant de court circuit	95
Figure 4.3 : Influence de l'épaisseur de l'émetteur sur la tension en circuit ouvert.	96
Figure 4.4 : Influence de l'épaisseur de l'émetteur de sur rendement	96
Figure 4.5 : L'influence du dopage de l'émetteur sur le courant de court circuit	97
Figure 4.6 : Influence du dopage de l'émetteur sur la tension en circuit ouvert	98
Figure 4.7 : Influence du dopage de l'émetteur sur le rendement	99
Figure 4.8 : Influence de dopage de l'émetteur sur le facteur de forme.	99
Figure 4.9 : Influence de l'épaisseur de la base de sur courant de court circuit.	100
Figure 4.10 : Influence de l'épaisseur de la base de sur la tension en circuit ouvert.	101
Figure 4.11 : Influence de l'épaisseur de la base sur le rendement	102
Figure 4.12 : Influence du dopage de la base sur le courant de court circuit	103
Figure 4.13: Influence du dopage de la base sur la tension en circuit ouvert	103
Figure 4.14 : Influence du dopage de la base sur le facteur de forme	104
Figure 4.15 : Influence du dopage sur le rendement	105
Figure 4.16 : Influence de l'épaisseur de la couche fenêtre sur le courant de court circuit	106
Figure 4.17 : Influence de l'épaisseur de la couche fenêtre de sur la tension en circuit ouvert.	107
Figure 4.18 : Influence de l'épaisseur de la couche fenêtre de sur le rendement	107
Figure 4.19 : Influence du dopage la couche fenêtre sur le courant de court circuit	108
Figure 4.20 : Influence du dopage de la couche fenêtre sur la tension en circuit ouvert	109
Figure 4.21 : L'influence du dopage de la couche fenêtre sur le rendement	110
Figure 4.22 : Influence de l'épaisseur sur le courant de court circuit	111
Figure 4.23 : La Variation de la tension de circuit ouvert en fonction d'épaisseur.	111

Figure 4.24 : Influence de l'épaisseur de BSF sur le rendement.	112
Figure 4.25: Influence du dopage de la couche BSF sur le courant de court circuit	113
Figure 4.26: Influence du dopage de la couche BSF sur la tension en circuit ouvert	113
Figure 4.27: Influence du dopage de la couche BSF sur le rendement	114
Figure 4.28 : Evolution du courant de court circuit de la cellule en fonction du dopage de l'émetteur avec variation de la vitesse de recombinaison superficielle	115
Figure 4.29: Evolution du la tension en circuit ouvert de la cellule en fonction du dopage de l'émetteur avec variation de la vitesse de recombinaison superficielle	116
Figure 4.30: Evolution du facteur de forme de la cellule en fonction du dopage de l'émetteur avec variation de la vitesse de recombinaison superficielle	117
Figure 4.31 : Evolution du rendement de la cellule en fonction du dopage de l'émetteur avec variation de la vitesse de recombinaison superficielle	118
Figure 4.32 : Effet de la température de fonctionnement sur les paramètres de performance de la cellule	119
Figure 4.33: variation de la densité de courant I(V) en fonction de la variation de température	120
Figure 4.34: Caractéristique I-V de la cellule optimisée SiGe	121
Figure 4.35 : Caractéristique J(V) relative à un échantillon de silicium poreux (P+) préparé à partir d'une solution de HF à 1% [10]	122
Figure 4.36 : Illustration du mécanisme de dissolution de p-type Si dans l'acide fluorhydrique [11].	124
Figure 4.37 : Micrographies sur la tranche obtenues par MEB de couches de silicium poreux montrant la différence de morphologie selon le type et la concentration de dopants ; type P+ (a), type N+ (b), type P (c), type N (d) [16]	127
Figure 4.38: variation de l'indice de réfraction en fonction de la porosité pour un substrat de silicium dopé avec 10^{19}cm^{-3} de bore [27]	129
Figure 4.39 : Spectres d'absorption d'échantillons de silicium poreux de porosités voisines réalisés à partir de substrats de types P et P+, comparés à celui du silicium massif (en trait plein) [30]	130
Figure 4.40 : Structure de la cellule simulée sous SILVACO –Atlas	132
Figure 4.41 : Indices de réfraction du silicium poreux calculés par l'EMA de Bruggeman.	133
Figure 4.42 : Indices d'extinction du silicium poreux calculés par l'EMA de Bruggeman.	133

Figure 4.43 : $(\alpha h\nu)^2$ en fonction de l'énergie de l'onde électromagnétique incidente ($E = h\nu$) avec l'extrapolation de la partie linéaire de ces courbes	135
Figure 4.44 : Variation des paramètres photovoltaïques de la cellule en fonction de porosité de SiP.	138
Figure 4.45: Caractéristique I-V de la cellule optimisée sous SILVACO-ATLAS	139

Liste des tableaux

Tableau 2.1: Trois premières lignes des colonnes III, IV, et V d tableau de Mendeleïev.	43
Tableau 2.2 : Paramètres des atomes des cristaux de silicium et de germanium massifs.	45
Tableau 2. 3 : Mobilité des électrons et des trous dans le silicium et le germanium.	56
Tableau 2.4: Energies de bande interdite directe et indirecte du Si et du Ge à 300K, [25].	62
Tableau 4.1 : Paramètres extraits de la simulation pour la structure simulée	94
Tableau. 4.2 : Les paramètres photovoltaïques de cellule solaire SiGe optimisée.	121
Tableau 4.3 : Les différentes classes du silicium poreux selon la taille des pores [17]	126
Tableau 4.4 : L'énergie de gap du Silicium poreux pour différentes porosité	136
Tableau 4.5 : Paramètres du SiGe et du Silicium Poreux (SiP) introduits utilisés dans la simulation	137
Tableau 4.6: Les paramètres photovoltaïques de cellule solaire optimisée.	139
Tableau 4.7: Comparaisons des résultats	140

Table des matières

Introduction Générale.....	1
Chapitre 1: GENERALITE SUR LES CELLULES PHOTOVOLTAIQUES	
1.1 Introduction.....	6
1.2 Définition et historique.....	6
1.3 Le rayonnement solaire.....	10
1.3.1 Le soleil.....	10
1.3.2 Spectre solaire	10
1.4 Absorption de la lumière.....	11
1.5 Recombinaison et durée de vie des porteurs libres.....	12
1.5.1 Recombinaison radiative « bande à bande ».....	13
1.5.2 Recombinaison Auger.....	13
1.5.3 Recombinaison Shockley Read Hall.....	13
1.5.4 Longueur de diffusion des porteurs minoritaires.....	14
1.6 Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque.....	14
1.6.1 L'interaction rayonnement/semi-conducteur.....	14
1.6.2 Principe de fonctionnement d'une cellule solaire.....	16
1.7 Caractérisation physique des cellules photovoltaïques.....	17
1.7.1 Caractéristique courant/tension et schéma équivalent.....	17
1.7.2 Paramètres caractéristiques d'une cellule solaire.....	20
1.7.2.1 Courant de court-circuit (I_{cc}).....	20
1.7.2.2 Tension de circuit ouvert (V_{oc}).....	20
1.7.2.3 Valeurs I_{max} et V_{max}	20
1.7.2.4 Facteur de forme ((FF).....	21
1.7.2.5 Rendement de conversion (η).....	21
1.7.2.6 Rendement quantique externe EQE (External Quantum Efficiency).....	22
1.7.2.7 Rendement quantique interne IQE (Internal Quantum Efficiency).....	22
1.8 Facteurs limitant le rendement.....	24

1.8.1. Pertes physiques.....	24
a. L'absorption incomplète des photons.....	24
b. L'excès d'énergie des photons (thermalisation).....	25
c. Le facteur de tension.....	25
d. Le facteur de forme.....	25
1.8.2 Pertes technologiques.....	25
a. Réflectivité.....	25
b. Taux d'ombrage.....	25
c. Rendement d'absorption.....	25
d. Rendement de collecte.....	26
1.9 Les différentes technologies de cellule solaire.....	26
1.9.1 Cellules solaires de première génération.....	26
1.9.2 Cellules solaires de seconde génération.....	28
1.9.2.1 Silicium amorphe (a-Si).....	28
1.9.2.2 Cellule à base de tellure de cadmium.....	29
1.9.2.3 Cellule à base de sélénure de cuivre indium.....	29
1.9.3 Les cellules solaires de la troisième génération.....	29
1.9.3.1 Cellules solaire à Concentration.....	30
1.9.3.2 Cellules nanocristallines à colorant (cellules de Grätzel).....	30
1.9.3.3 Cellules solaires organiques.....	31
1.10 Les constituants de base d'une cellule photovoltaïque.....	31
1.10.1 Passivation des faces avant et arrière.....	32
1.10.2 Couche antireflet.....	32
1.10.3 Texturation de la surface.....	33
1.10.4 Contacts face avant et arrière.....	33
1.10.5 BSF.....	33
1.11 Structure d'une cellule photovoltaïque à haut rendement (PERL).....	34
1.12 Conclusion.....	35
Références bibliographiques Chapitre 1.....	36

Chapitre 2: ETUDE DES MATERIAUX IV-IV SiGe

2.1 Introduction.....	41
2. 2 Les semiconducteurs IV-IV	41
2.3. Le matériau Silicium-Germanium SiGe.....	42

2.4. Caractéristiques structurelles.....	42
2.4.1 Obtention de cristaux massifs de Si et de Ge.....	42
2.4.2. Structure cristalline.....	43
2.4.3 Paramètres de maille des alliages Si _{1-x} Ge _x	46
2.5 Propriétés électriques.....	50
2.5.1 Structure de bande du SiGe.....	53
2.5.2 Mobilité des porteurs de charge.....	55
2.5.3 La longueur de diffusion.....	56
2.6 Propriétés thermique.....	57
2.6.1 Conductivité thermique.....	57
2.6.2 Température de fusion des alliages Si _{1-x} Ge _x	58
2.7 Propriété optique.....	59
2.7.1 Indice de réfraction.....	59
2.7.2 Gap d'absorption.....	62
2.8 Conclusion.....	65
Références bibliographies Chapitre 2.....	66

Chapitre 3: GENERALITE SUR LES LOGICIELS DE SIMULATION (AMPS-1D et Silvaco)

3.1 Introduction.....	70
3.2 Présentation du logiciel AMPS-1D.....	70
3.2.1 Équation de Poisson.....	71
3.2.2 Équations de continuité.....	71
3.2.3 Équations de transport.....	72
3.2.4 Résolution numérique du système d'équation de base.....	73
3.2.5 Utilisation de l'AMPS.....	75
3.2.5.1 Propriétés générales du dispositif et du matériau.....	76
A- Les propriétés du matériau.....	76
B- Propriétés générales du dispositif.....	77
3.2.5.2 Conditions environnementales.....	78
3.2.5.3 Paramètres de modélisation.....	78
3.2.6 Avantages et inconvénients de l'AMPS.....	79
3.3 Logiciel de simulation SILVACO	79

3.3.1 Présentation du paquet des programmes Silvaco	80
3.3.1.1 Les outils de simulation (VWF core tools).....	80
3.3.1.2 Les outils interactifs (VWF interactive tools).....	81
3.3.2 Description d'Atlas	82
3.3.3 Logique de programmation.....	84
1- Spécification de la structure.....	85
2- Spécification des matériaux et des modèles.....	85
3-Sélection des Méthodes numériques.....	86
4-Sélection des paramètres à extraire.....	86
5-Analyse des résultats.....	87
3.3.4 Conclusion.....	87
Références bibliographiques Chapitre 3.....	88

Chapitre 4: RESULTATS ET DISCUSSION

4.1 Introduction.....	91
Partie I : Simulation d'une cellule solaire à base de SiGe avec AMPS 1D	
4.2. Structure de la cellule solaire utilisée.....	91
4.3 Paramètres de simulation.....	91
4.4 Influence des paramètres de l'émetteur sur les performances de la cellule	95
4.4.1 Influence des paramètres de l'émetteur sur les performances de la cellule...	95
4.4.2 L'effet du dopage de l'émetteur.....	97
4.5 Influence des paramètres de la couche base sur les performances de la cellule.....	100
4.5.1 L'effet de l'épaisseur de la couche base.....	100
4.5.2 L'effet de dopage de la couche base.....	102
4.6 Influence des paramètres de la couche fenêtre sur les performances de la cellule.....	106
4.6.1 L'effet de l'épaisseur de la couche fenêtre.....	106
4.6.2 L'effet du dopage de la couche fenêtre.....	108
4.7 Influence des paramètres de la couche BSF sur les performances de la cellule.....	110
4.7.1 L'effet de l'épaisseur de la couche BSF.....	110
4.7.2 L'effet de dopage de la couche BSF.....	112
4.8 Etude influence de la vitesse de recombinaison sur le rendement de la cellule.....	115
4.8.1 Influence de la vitesse de recombinaison sur le rendement de la cellule.....	115
4.8.2 Influence de la vitesse de recombinaison superficielle sur la tension de circuit Ouvert.....	116

4.8.3 Influence de la vitesse de recombinaison superficielle sur le facteur de forme.....	117
4.8.4 Influence de la vitesse de recombinaison superficielle sur le rendement.....	118
4.9 Influence de la température sur les caractéristiques de la cellule solaire SiGe.....	119
4.10 Les performances optimales de la cellule SiGe étudiée.....	121
Partie II: Simulation d'une cellule solaire à base de SiGe avec une couche antireflet en Silicium poreux	
4.11 Présentation du silicium poreux	122
4.11.1 La formation du silicium poreux.....	122
4.11.2 Mécanisme de dissolution de Silicium.....	123
4.12 Caractéristiques du silicium poreux	124
4.12.1 Porosité.....	124
4.12.2 Surface spécifique.....	125
4.12.3 Epaisseur.....	125
4.12.4 Morphologie.....	126
4.13 Propriétés optiques du silicium poreux.....	127
4.13.1 Propriétés de luminescence.....	128
4.13.2 L'indice de réfraction du silicium poreux.....	128
4.13.3 Le coefficient d'absorption du silicium poreux.....	129
4.14 Modélisation du Silicium poreux selon l'approximation du milieu effectif de Bruggeman.....	130
4.14.1 Approximation des milieux effectifs de Bruggeman (BEMA).....	130
4.15 Etude de l'influence d'une couche Antireflet en Silicium Poreux sur les performances de la cellule solaire à base de SiGe.....	132
4.15.1 Structure étudié.....	132
4.15.2 Détermination des indices optiques du Silicium Poreux (SiP).....	132
4.15.3 Paramètres Caractéristiques de la Cellule Utilisée.....	134
4.15.4 Effet de la porosité de silicium poreux sur les performances de la cellule...	137
4.16 Les performances optimales de la cellule étudiée.....	139
4.17 Comparaisons des résultats obtenus.....	140
4.18 Conclusion.....	140
Références bibliographiques Chapitre 4.....	142
Conclusion générale.....	146

INTRODUCTION GENERALE

INTRODUCTION GENERALE

La situation énergétique mondiale actuelle et son évolution dans le futur sont des problématiques extrêmement importantes, qui concernent l'ensemble de l'humanité. L'énergie issue de sources fossiles, qui est très largement utilisée aujourd'hui, est polluante, rejette d'importantes quantités de gaz à effets de serre, génère des tensions géopolitiques et des problèmes de sûreté. De plus la quantité disponible de ces ressources va s'amenuiser à plus ou moins brève échéance. Les importantes conséquences environnementales et sociétales de nos modes de production et de consommation d'énergie nous amènent donc à devoir complètement repenser ceux-ci afin de les rendre plus durables.

Une partie importante de la solution à cette problématique réside dans l'accroissement de la part des énergies renouvelables dans le bouquet énergétique. En effet, ces énergies rejettent moins de gaz à effet de serre et de polluants, et ont une source d'énergie qui ne s'épuisera pas à cause d'une utilisation intensive.

Parmi ces énergies renouvelables, l'énergie photovoltaïque, qui est la conversion directe de l'énergie que nous envoie le soleil en électricité, a un rôle majeur à jouer. En effet, entre autres avantages, elle utilise une source d'énergie renouvelable, abondante et bien distribuée dans le monde. De plus, son impact sur l'environnement est parmi les plus faibles. Le développement de sa capacité installée est rapide, mais encore retenue par les coûts de production des systèmes photovoltaïques [1].

Le développement des cellules photovoltaïques a commencé en 1839, lorsque le physicien français Edmond Becquerel a mis en évidence l'apparition d'une tension aux bornes de deux électrodes immergées dans une solution électrolytique, lorsque celles-ci étaient exposées à la lumière naturelle. Trente-huit ans plus tard, W.G. Adams et R.E. Day ont observé un effet similaire en éclairant un échantillon solide en sélénium. En 1954, des chercheurs des laboratoires « Bell Telephone Laboratories » ont fabriqué la première cellule solaire à base de silicium monocristallin, ayant un rendement de conversion en puissance de 6 % [2].

Le développement des programmes spatiaux a ensuite entraîné une demande de cellules solaire à base de semi-conducteurs tels que le silicium, qui sont rapidement devenues une source incontournable pour l'alimentation des satellites.

Ce n'est qu'au début des années 1970 et surtout après les crises pétrolières successives que les pays industrialisés ont porté leur intérêt sur les systèmes photovoltaïques pour des applications terrestres. Actuellement, les rendements ont atteint plus de 32 % en laboratoire et entre 8 et 16 % pour les cellules du commerce [1].

Les cellules solaires photovoltaïques (PVs) présentent beaucoup d'avantages. Elles sont élégantes, non polluantes, silencieuses et sans pièces rotatives. En outre, l'énergie solaire PV est la seule source d'énergie qui peut fournir de l'énergie de l'échelle de milliwatts à plusieurs mégawatts à partir d'une technologie modulaire.

L'utilisation des cellules photovoltaïques pour obtenir la conversion de l'énergie solaire en électricité est une voie prometteuse pour exploiter cette source d'énergie durable.

L'électricité photovoltaïque représente une énergie inépuisable puisqu'elle est directement générée à partir du soleil. Son développement est une réponse nécessaire aux questions énergétiques actuelles. Par contre, elle est limitée par son coût élevé et son rendement relativement faible. Réduire les coûts et augmenter les performances, est l'objectif principal pour rendre le solaire photovoltaïque compétitif

Aujourd'hui, la production d'électricité photovoltaïque est largement dominée par le silicium avec 95 % des panneaux photovoltaïques installés (monocristallin, polycristallin et couche mince) [3, 4]. Cependant, ces panneaux commerciaux souffrent d'un faible rendement moyen, environ 13 % (entre 12 et 18 % pour le monocristallin, entre 12 et 15 % pour le polycristallin et entre 6 et 9 % pour les couches minces). C'est pourquoi de nombreuses recherches se tournent sur l'augmentation de l'efficacité des panneaux en silicium (nanostructures, couches minces, etc.) et sur des matériaux alternatifs possédant un meilleur rendement (SiGe, CdTe, CIGS, GaAs, etc.). Généralement, ces nouveaux matériaux sont déposés en couches minces (quelques centaines de nanomètres), mais présentent toujours des rendements intéressants, réduisant ainsi les coûts de production [3].

Parmi les nouveaux matériaux en couche mince considérés pour le photovoltaïque, l'alliage SiGe possède le potentiel pour réaliser une avancée majeure de l'industrie photovoltaïque. En effet, ces matériaux possèdent des caractéristiques uniques pour réaliser des cellules solaires à très haut rendement de conversion grâce à une bande d'énergie interdite large. Le SiGe possède d'autres avantages, notamment, un coefficient d'absorption très élevé dans toute la gamme du spectre solaire, des mobilités élevées, des masses effectives relativement faible et une très grande résistance aux rayonnements.

Quelle que soit la structure d'une cellule solaire, une optimisation de ses paramètres est nécessaire afin d'obtenir un bon rendement. La simulation numérique est couramment utilisée pour l'optimisation des cellules solaires, c'est un moyen performant d'analyse et de compréhension des phénomènes physiques qui peut aider à la réalisation de plusieurs prototypes de cellules avec des conditions et paramètres optimaux.

L'objectif de notre étude est la simulation numérique des performances des cellules solaires à base de SiGe.

Ce manuscrit se présente en quatre chapitres de la façon suivante :

Dans le premier chapitre, nous décrivons les notions préliminaires sur la source d'énergie nécessaire dans le domaine photovoltaïque : le rayonnement solaire, le principe de fonctionnement des cellules solaires photovoltaïques, leurs caractéristiques principales, les différents paramètres des cellules solaires et quelques facteurs limitant le rendement, Puis nous avons expliqué les différents constituants de base d'une cellule photovoltaïque conventionnelle.

Le deuxième chapitre est consacré à l'étude du matériau SiGe, ses caractéristiques, et ses propriétés..

Nous aborderons ensuite dans le troisième chapitre d'une part, le modèle analytique utilisé pour simuler les performances de la cellule et d'autre part, les logiciels de simulations AMPS-1D et Silvaco ATLAS utilisés dans le cadre de notre travail.

Dans le quatrième et dernier chapitre, nous avons présenté dans une première partie, les résultats obtenus de la simulation d'une cellule solaire à base de SiGe en variant les paramètres technologiques (épaisseurs, dopages) et l'effet de la température de chaque région de la cellule en utilisant le logiciel AMPS 1D (Analysis of Microelectronic and Photonic Structures). Dans une deuxième partie, nous avons présenté l'effet de Silicium poreux (SiP) utilisés comme couche antireflet sur les performances de la cellule solaire optimisée à base de SiGe en utilisant le logiciel SILVACO-ATLAS. Effectivement, après la comparaison des résultats obtenus, on a pu confirmer que cette couche antireflet pourrait apporter une amélioration significative au rendement énergétique de la cellule.

Enfin, nous terminerons ce manuscrit par une conclusion générale dans laquelle nous présenterons l'ensemble des résultats significatifs que nous avons obtenus au cours de ce travail ainsi que des perspectives indiquant les futures continuités du sujet de recherche.

Référence

- [1] M. Grau « Réalisation de nouvelles structures de cellules solaires photovoltaïques à partir de couches minces de silicium cristallin sur substrat de silicium préparé par frittage de poudres ». Thèse de doctorat, L'institut national des sciences appliquées de Lyon. (2012)
- [2] D.M. Chapin, C.S. Fuller, G.L. Pearson, A New Silicon p-n Junction Photocell for Converting Solar Radiation into Electrical Power, *J. Appl. Phys.* 25 (1954) 676–677
- [3] S.Zhoua, J. Sun, « Charge carrier density dependent transport in disordered organic photovoltaic devices », *Optik*, 126, 3678-3682, (2015).
- [4] C. G. Shuttle, B. O'Regan, A. M. Ballantynev, J. Nelson, D. D. C. Bradley, J. R. Durrant. « Recombination losses in polythiophene: Fullerene solar cells ». *Physical Review B.* 78 .113201. (2008)

CHAPITRE 1

***GENERALITES SUR LES CELLULES
PHOTOVOLTAIQUES***

1.1 Introduction

Dans ce premier chapitre nous commencerons tout d'abord par un bref historique qui établit la position des cellules solaires par rapport aux autres systèmes de production d'énergie électrique, ainsi quelques notions sur le rayonnement solaire et son application dans le domaine photovoltaïque. Nous décrirons ensuite le fonctionnement des cellules photovoltaïques, leurs caractéristiques principales et les pertes limitant leur rendement de conversion. Nous présentons les paramètres essentiels qui permettent de calculer le rendement d'une cellule solaire à partir de la caractéristique courant-tension. Puis, nous expliquons les différents constituants de base d'une cellule photovoltaïque conventionnelle.

1.2 Définition et historique

Le mot « photovoltaïque » (PV) est composé de deux mots; « photo » qui veut dire lumière et voltaïque» (d'après le nom du physicien italien Alessandro Volta (1745-1825) qui a découvert la première batterie électrochimique) qui veut dire électricité. Donc la définition de la conversion photovoltaïque est la transformation directe de la lumière en électricité à l'aide d'une cellule photovoltaïque [1]. La principale source lumineuse inépuisable étant le soleil.

- L'effet photovoltaïque a été découvert par le physicien français Edmond Becquerel (1788-1878) en 1839. Il plaçait deux électrodes enrobées de platine dans un récipient avec un électrolyte et a déterminé un courant circulant entre elles (Figure 1.1.a), Becquerel a constaté que l'intensité du courant a changé lorsqu'il est exposé à la lumière. Il s'agissait de l'effet photovoltaïque externe,
- En 1873, l'ingénieur britannique Willoughby Smith et son assistant Joseph May ont découvert que le semi-conducteur sélénium a changé sa résistance lorsqu'il est exposé à la lumière. Il s'agissait de l'effet photovoltaïque interne, dans lequel les électrons sont arrachés par la lumière et devenus donc des porteurs de charge libres dans le semi-conducteur,
- Trois années plus tard, les anglais William Adams et Richard Day ont découvert qu'une tige de sélénium munie d'électrodes de platine peut produire de l'énergie électrique lorsqu'elle est exposée à la lumière (Figure 1.1.b). Il a été prouvé pour la première fois qu'un corps solide peut directement convertir l'énergie lumineuse en énergie électrique,

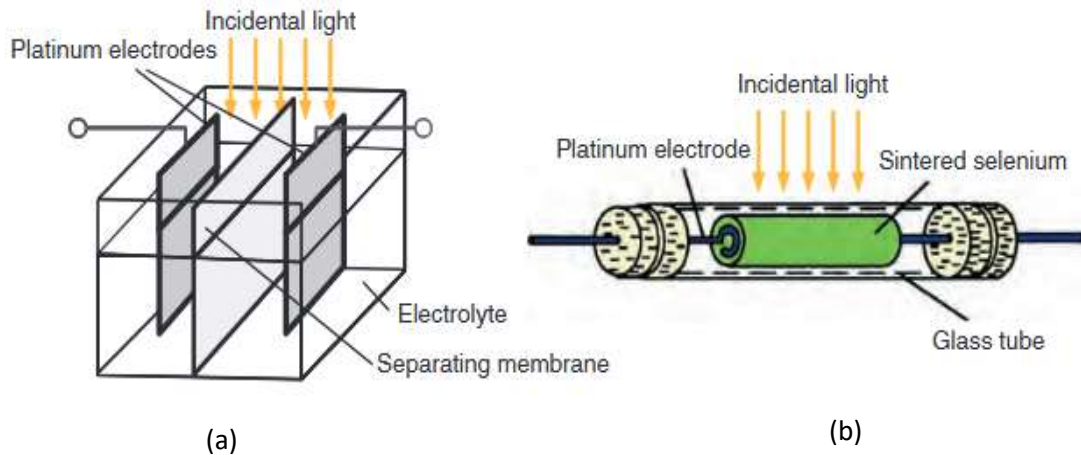


Figure 1.1: Les débuts du photovoltaïque: (a) Expérience électrochimique de A.E. Becquerel, (b) La première cellule solaire d'Adams et Day [1]

- En 1883, l'inventeur américain Charles Fritts construit un petit "Module" de cellules de sélénium en les couvrant avec une très mince électrode d'or, d'une superficie d'environ 30 cm² en obtenant un rendement de conversion d'environ 1%,
- En 1904, Albert Einstein (1879-1955) expliqua la théorie de l'effet photoélectrique, au même temps et dans le même domaine, il y avait d'autres avancées technologiques: En 1916 le chimiste polonais Jan Czochralski a découvert le processus de croissance cristalline (qui prend son nom), il est devenu donc possible de produire des monocristaux semi-conducteurs de haute qualité,
- En 1949, William B. Shockley (1910–1989) a établi la théorie de la jonction PN [2] et a lancé les bases théoriques des cellules solaires utilisées aujourd'hui
- Sur cette base, Daryl Chapin, Calvin Fuller et Gerald Pearson ont développé dans les laboratoires Bell, la première cellule solaire de silicium d'une superficie de 2cm² et un rendement allant jusqu'à 6 % et l'ont présenté au public le 25 Avril 1954 [3] (Figure 1.2),
- Ce rendement a atteint les 10 % dans les années qui ont suivi, mais avec des prix élevés du module solaire (le prix par Watt était environ 1000 fois plus que le prix d'aujourd'hui) donc ils étaient utilisés uniquement pour des applications spéciales [4],

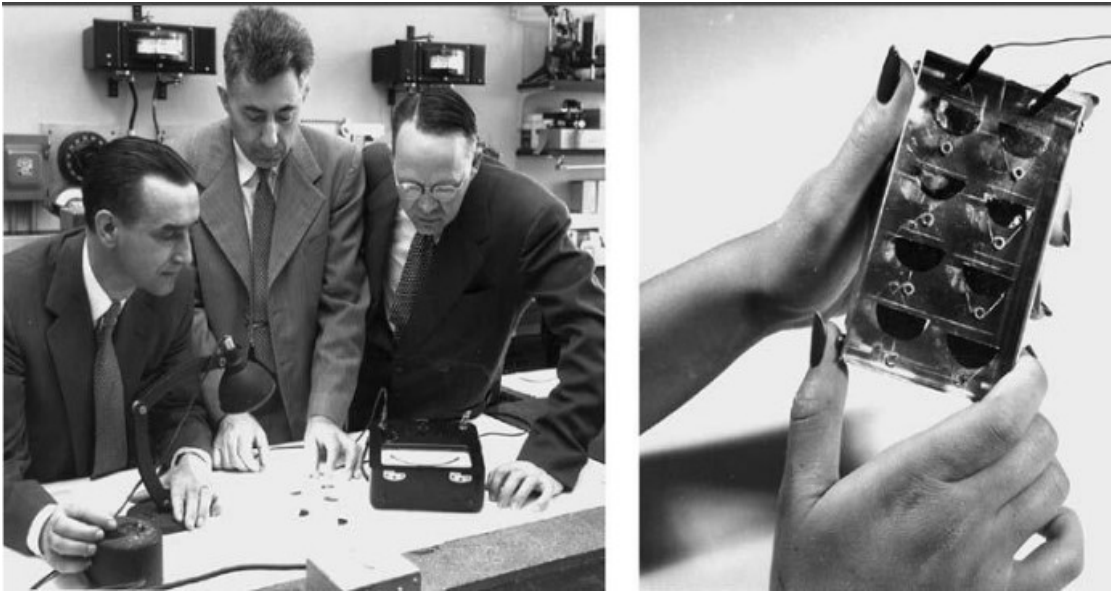


Figure 1.2: Les inventeurs de la première cellule solaire "réelle": Chapin, Fuller et Pearson. La figure à droite montre le premier module solaire au monde (mini module de 8 cellules solaires) [1]

Le 17 Mars 1958, Le premier emploi aérospatial de l'énergie photovoltaïque était par le satellite artificiel américain Vanguard,

Dans les années 1960, le développement en photovoltaïque était très avancé en utilisant des nouveaux matériaux semi-conducteurs comme l'arséniure de gallium (GaAs) [4],

Au cours de la période 1974-1985 qui couvre, pratiquement, les deux chocs pétroliers, la technologie photovoltaïque terrestre a progressé régulièrement par la mise en place de plusieurs centrales de quelques mégawatts, et même est devenue familière des consommateurs à travers de nombreux produits de faible puissance y faisant appel: montres, calculatrices, balises radio et météorologiques, pompes et réfrigérateurs solaires [5].

Les recherches dans ce domaine continuent à se développer très rapidement avec de nouvelles technologies atteignant des rendements très élevés (Figure 1.3) [6]

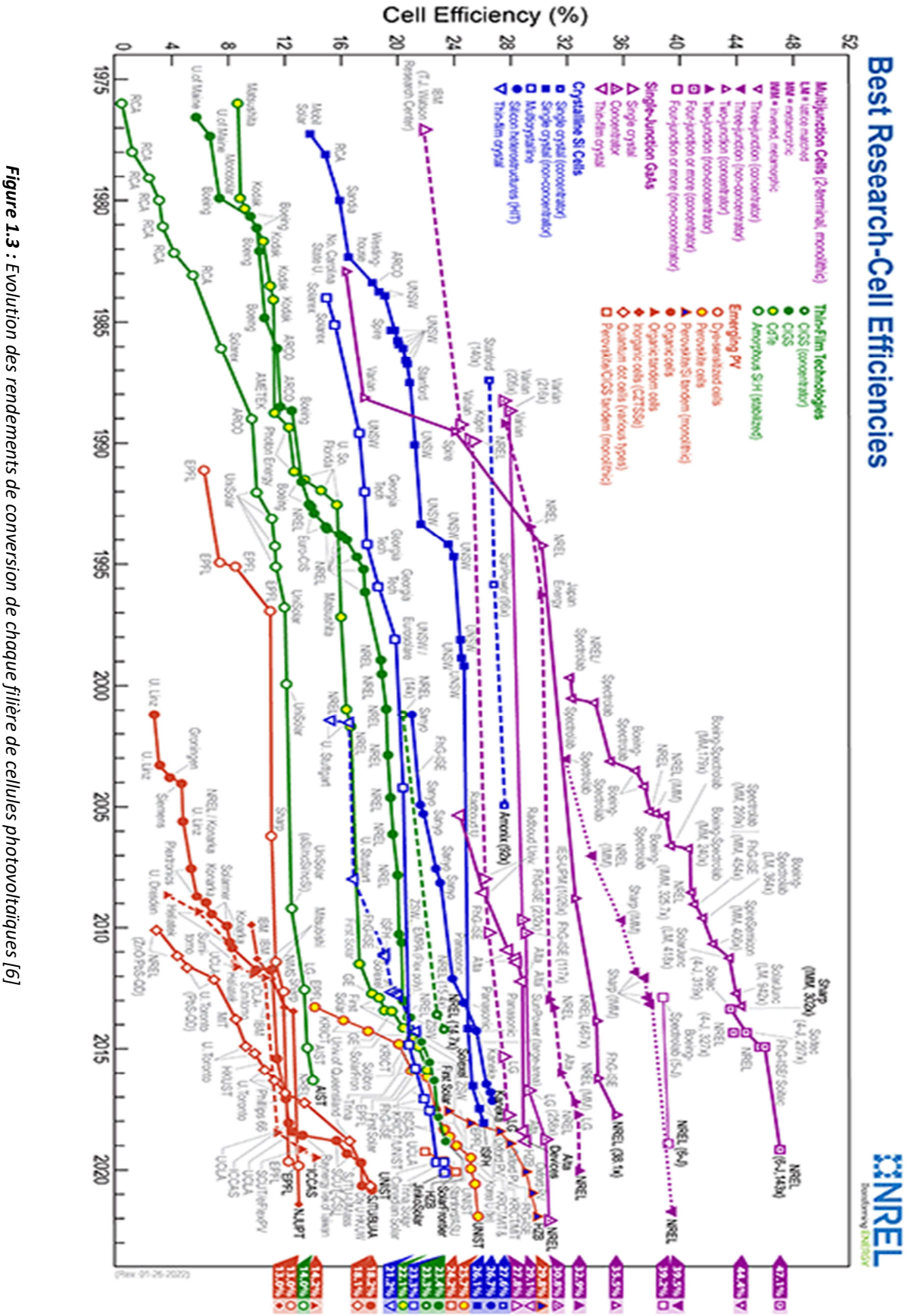


Figure 1.3 : Evolution des rendements de conversion de chaque filière de cellules photovoltaïques [6]

1.3 Le rayonnement solaire

1.3.1 Le soleil

Le soleil est une étoile parmi tant d'autres. Il a un diamètre de 1390000 km, soit environ 50 fois celui de la terre. Il est composé à 80% d'hydrogène, 19% d'hélium et 1% d'un mélange de 100 éléments, soit pratiquement tout les éléments chimiques connus depuis que Lavoisier et Laplace, s'appuyant sur la théorie de la relativité d'Einstein, ont émis l'idée il y a une soixantaine d'années que c'est l'énergie de fusion nucléaire qui fournit au soleil sa puissance, il est aujourd'hui admis que le soleil est une bombe thermonucléaire hydrogène hélium transformant chaque seconde 564 millions de tonnes d'hydrogène en 560 millions tonnes d'hélium; la réaction se faisant dans son noyau à la température d'environ 25 millions de degrés Celsius. Ainsi, à chaque seconde, le soleil est allégé de 4 millions de tonnes dispersées sous forme de rayonnement. Sa lumière, à une vitesse de 300000 km/s, met environ 8 minutes pour parvenir à la terre.

1.3.2 Spectre solaire

Les longueurs d'onde du rayonnement électromagnétique du spectre solaire sont comprises entre 290 nm et 2770 nm avec les rayons ultraviolets, la lumière visible et les rayons infrarouges. L'atmosphère terrestre joue le rôle de filtre, les nombreux gaz présents dans l'atmosphère absorbent une partie du rayonnement. La notion d'Air Mass (AM) quantifie la puissance absorbée par l'atmosphère en fonction de l'angle θ du soleil par rapport au zénith.

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

Le spectre solaire AM 0 représente le spectre solaire hors atmosphère, il est principalement utilisé dans le cadre des applications spatiales. Le spectre AM 1.5 représente le spectre solaire sur Terre au niveau de la mer (soleil au zénith par temps clair avec un angle de 48°) [7].

La figure 1.4 présente l'intensité lumineuse en fonction de la longueur d'onde λ des spectres AM 0 et AM 1.5G. On remarque l'absorption très importante due à l'atmosphère à certaines longueurs d'ondes. Le spectre AM 1.5 G est composé du rayonnement qui arrive de manière directe et du rayonnement diffus.

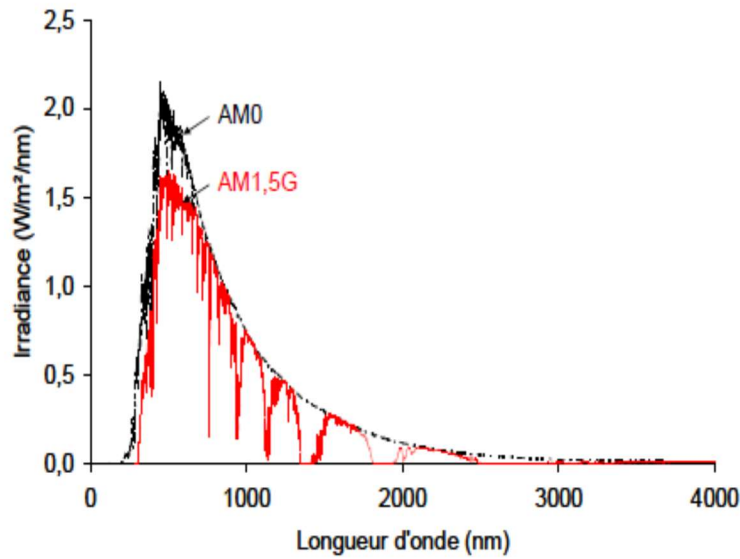


Figure 1.4: Représentation des spectres solaires AM0 et AM1,5G [8]

Le spectre solaire AM1.5G donne une irradiance de 970 W/m² arrondie à 1 kW/m². L'intensité I_D reçue à la surface de la terre peut être calculée à l'aide de l'équation:

$$I_D = 1.353 \cdot (0.7^{AM})^{0.678} \quad (1.2)$$

1.4 Absorption de la lumière

La lumière peut être considérée sous forme d'ondes électromagnétiques de longueur d'onde λ ou sous forme de photons corpuscules possédant une énergie E liée à λ par la relation (1.3).

$$E_p = h\gamma = \frac{hc}{\lambda} \quad (1.3)$$

Avec :

h : Constante de Planck (J. s).

γ : Fréquence du photon (s⁻¹)

c : Vitesse de la lumière dans le vide (m. s⁻¹).

λ : Longueur d'onde du photon (m).

Une radiation lumineuse rencontrant un semi-conducteur est absorbée suivant la loi de Lambert-Bouguer:

$$I(x) = I(1 - R)\exp(-\alpha x) = I_0 \exp(-\alpha x) \quad (1.4)$$

Où I : le flux de photons ($\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$), x : profondeur d'absorption du faisceau dans le matériau à partir de la surface du semiconducteur, R : coefficient de réflexion, représente la part de l'énergie lumineuse incidente I , réfléchi à la surface du matériau, α : coefficient d'absorption, traduit la probabilité d'absorption d'un photon par unité de longueur.

Quand les photons incidents ont une énergie suffisante pour provoquer le transfert des électrons de la bande de valence vers la bande de conduction, des paires électron-trou peuvent se créer. Ce phénomène appelé mode d'absorption intrinsèque ou fondamentale prédomine dans les cellules solaires [9].

Le calcul du taux de génération de paires électron-trou, $G(x)(\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1})$ s'effectue de la façon suivante. Appelant I_0 , le flux de photons ($\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$) incidents sur la face éclairée du matériau et α (cm^{-1}) le coefficient d'absorption de la lumière par le matériau. A la profondeur x , ce taux de génération vaut:

$$G(x) = \alpha \cdot (1 - R)I_0 \exp(-\alpha x) \quad (1.5)$$

1.5 Recombinaison et durée de vie des porteurs libres

Lorsqu'un matériau semiconducteur est soumis à une excitation (thermique, lumineuse, etc.), son équilibre est rompu et des porteurs en excès apparaissent. Ces porteurs restent libres jusqu'à ce qu'ils perdent leur énergie, c'est-à-dire qu'ils se recombinent [9] [13]. Différents phénomènes de recombinaison peuvent exister au sein du semiconducteur. Certains sont intrinsèques au matériau comme les phénomènes Auger et radiatifs alors que d'autres dépendent de la qualité du matériau [10, 11].

Pour un porteur de type n, le taux de recombinaison R_n est:

$$R_n = \frac{\Delta n}{\tau_n} \quad (1.6)$$

Où τ_n est la durée de vie des porteurs de type n qui correspond au temps moyen entre la création d'une paire électron-trou et sa recombinaison et Δn représente la concentration de porteurs en excès exprimée en (cm^{-3}).

1.5.1 Recombinaison radiative « bande à bande »

Cette recombinaison est spontanée et correspond à la transition d'un électron de la bande de conduction à la bande de valence avec émission d'un photon comme représenté sur la figure (1.5.a). Ce photon peut éventuellement être absorbé et engendrer la formation d'une nouvelle paire électron-trou [14].

1.5.2 Recombinaison Auger

Le second mécanisme de recombinaison est le processus de recombinaison non radiatif appelé recombinaison Auger qui se manifeste lorsque la densité de porteurs libres (n et p) dépasse 10^{17} cm^{-3} [15] [16]. Le porteur recombinant transmet son énergie équivalente à la transition bande à bande à un porteur tiers, qui se trouve excité sur un niveau énergétique plus élevé. Notons que la participation de phonons à ce mécanisme entraîne un effet de « thermalisation » de la cellule. La figure (1.5.b) donne un exemple de ce type de transition bande à bande dans le cas d'un transfert d'énergie à un électron libre [17]

1.5.3 Recombinaison Shockley Read Hall

Ce type de recombinaison concerne les défauts cristallographiques et les impuretés métalliques (Cu, Fe, Au, Al, ...) présents dans le matériau est reposant les recombinaisons assistés par les multi photons. Il est plus couramment appelé Shockly-Read-Hall [18] [19]. Des niveaux profonds d'énergie dans la bande interdite sont responsables de la chute de la durée de vie des porteurs de charge, en créant des centres de recombinaison. Ils sont caractérisés par leur densité de concentration N_R et leur position énergétique E_R dans la bande interdite, leur section efficace de capture des porteurs σ_n et σ_p (cm^2/s). Le taux de recombinaison RSH est en fonction du niveau d'injection (figure 1.5.c).

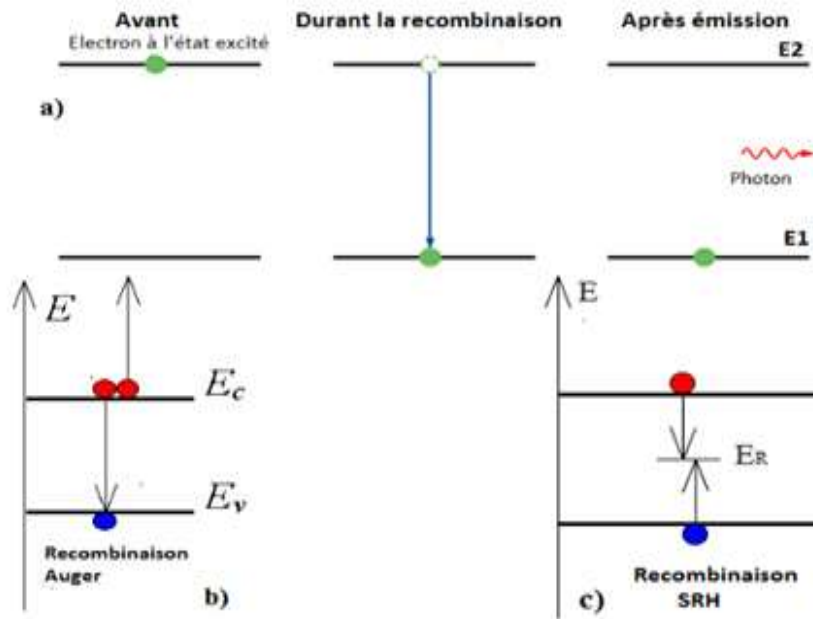


Figure 1.5 : Les types de recombinaison dans un semiconducteur a) bande à bande b) Auger c) Shockley Read Hall

1.5.4 Longueur de diffusion des porteurs minoritaires :

La longueur de diffusion des porteurs minoritaires (L_p dans un matériau de type n et L_n dans un matériau de type p) caractérise la distance que peuvent atteindre les porteurs photogénérés avant de se recombiner. Elle est donnée par l'équation:

$$L = \sqrt{D\tau} \quad (1.7)$$

1.6 Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque

Pour mieux comprendre le principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque, il est important de décrire les phénomènes qui régissent l'interaction entre un semi-conducteur et le rayonnement lumineux.

1.6.1 L'interaction rayonnement/semi-conducteur

Les trois processus qui peuvent se produire lors de l'interaction rayonnement/ semi-conducteur sont :

- L'absorption fondamentale qui représente le passage d'un électron d'un état occupé de la bande de valence à un état vide de la bande de conduction après l'absorption d'un photon.

- L'émission spontanée qui représente le passage d'un électron de la bande de conduction à la bande de valence avec émission d'un photon.
- L'émission stimulée qui représente le passage d'un électron de la bande de conduction à la bande de valence suite à l'absorption d'un photon avec l'émission d'un deuxième photon.

Ces différents processus sont en fonction du type de semi-conducteur. Nous devons distinguer les semi-conducteurs à bande interdite directe et ceux à bande interdite indirecte.

Un semi-conducteur est à bande interdite directe quand le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont obtenus pour une même valeur du vecteur d'onde k (figure I.6 (a)). Les transitions bande à bande (de la bande de conduction vers la bande de valence) sont radiatives (émission spontanée) et sont favorisées avec ce type de semi-conducteur utilisé en optoélectronique (matériau III-V en général comme le GaAs).

Un semi-conducteur est à bande interdite indirecte quand le minimum de la bande de conduction est décalé par rapport au maximum de la bande de valence dans l'espace des k . Les transitions bande à bande impliquent un changement de vecteur d'onde k et sont donc non-radiatives (figure 1.6 (b)). Ceci est le cas même si avec un photon de plus grande énergie, un électron peut être directement excité vers un minimum relatif de la bande de conduction et se thermalise dans le minimum absolu de la bande de conduction. La transition d'un électron dans un matériau à bande interdite indirecte est assistée par un phonon absorbé ou émis par l'électron afin que son vecteur d'onde corresponde au maximum de la bande de valence pour absorber un photon.

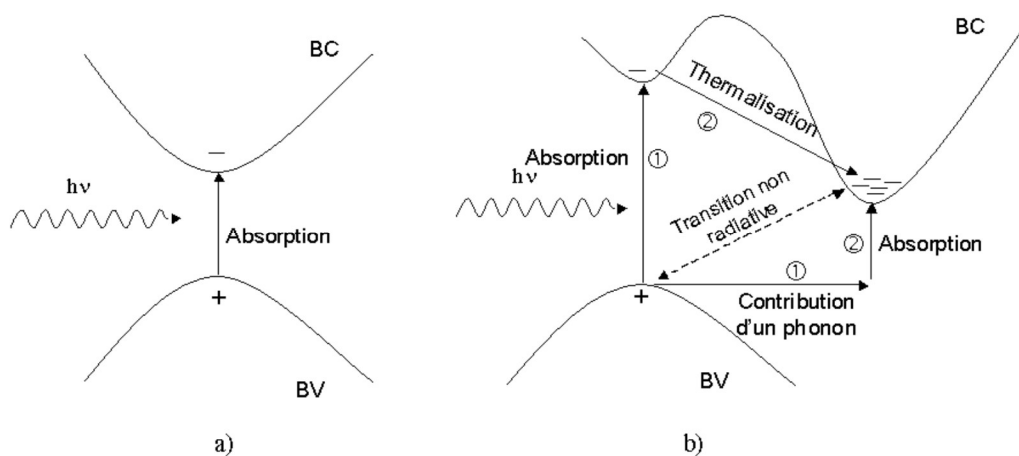


Figure 1.6: Transitions inter-bandes d'électrons dans un semi-conducteur. Le cas a) correspond à un semi-conducteur à gap direct, le cas b) à un gap indirect (d'après [20]).

1.6.2 Principe de fonctionnement d'une cellule solaire

Une cellule photovoltaïque est un dispositif qui permet de transformer l'énergie solaire en énergie électrique. Cette transformation est basée sur les trois mécanismes suivants :

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

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

Afin de collecter les particules générées, un champ électrique permettant de dissocier les paires électrons / trou créées est nécessaire. Pour cela on utilise le plus souvent une jonction P-N. D'autres structures, comme les hétérojonctions et les Schottky peuvent également être utilisées. Le fonctionnement des cellules photovoltaïques est illustré sur la figure 1.7.

Les photons incidents créent des porteurs dans les zones N et P et dans la zone de charge d'espace. Les photo-porteurs auront un comportement différent suivant la région :

Dans la zone N ou P, les porteurs minoritaires qui atteignent la zone de charge d'espace sont "envoyés" par le champ électrique dans la zone P (pour les trous) ou dans la zone N (pour les électrons) où ils seront majoritaires. On aura un photocourant de diffusion,

Dans la zone de charge d'espace, les paires électrons/ trou créées par les photons incidents sont dissociées par le champ électrique : les électrons vont aller vers la région N, les trous vers la région P. On aura un photocourant de génération [21].

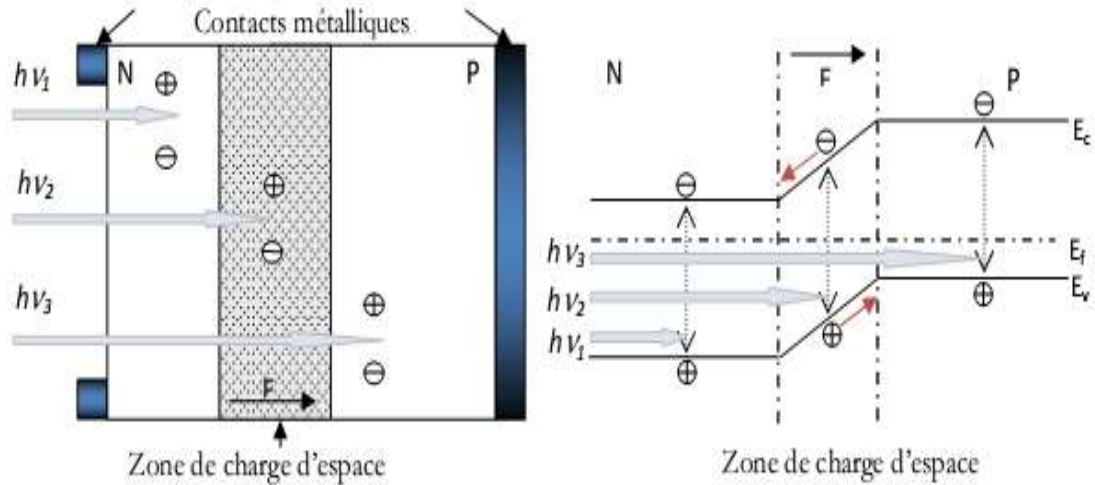


Figure 1.7: Structure (image gauche) et diagramme de bande (image droite) d'une cellule photovoltaïque. Les dimensions respectives des différentes zones ne sont pas respectées [21].

1.7 Caractérisation physique des cellules photovoltaïques

Une cellule photovoltaïque est caractérisée par des données issues de l'observation de sa caractéristique $I(V)$ sous illumination. De cette caractéristique peuvent être extraits leur rendement de conversion η , leur tension en circuit ouvert V_{oc} , leur courant de court-circuit I_{sc} et leur facteur de forme FF. Nous allons expliciter ces termes dans les paragraphes qui suivent.

1.7.1 Caractéristique courant/tension et schéma équivalent

La figure 1.8 représente les caractéristiques courant-tension d'une cellule photovoltaïque sous obscurité et sous éclaircissement.

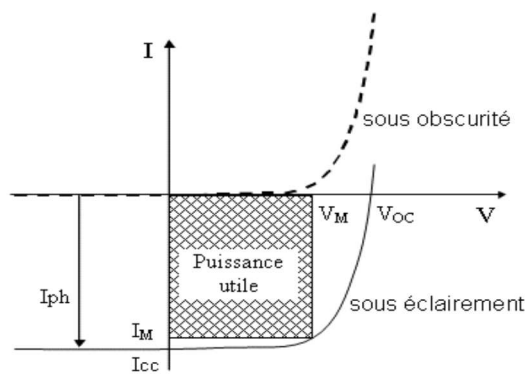


Figure 1.8: Caractéristiques $I=f(V)$ sous obscurité et sous éclaircissement d'une cellule photovoltaïque [21]

Pour une cellule solaire sous obscurité et polarisée par une tension V , la courbe obéit à l'équation de Shockley suivante:

$$I = I_s \cdot \left(\exp\left(\frac{qV}{nkT}\right) - 1 \right) \quad (1.8)$$

Où : I_s est le courant de saturation, q la charge de l'électron, k la constante de Boltzmann, T la température et n le facteur d'idéalité de la diode qui tient compte des recombinaisons.

Sous éclaircissement, un terme I_{ph} , tenant compte du photocourant généré est rajouté. On obtient l'équation suivante:

$$I = I_s \cdot \left(\exp\left(\frac{qV}{nkT}\right) - 1 \right) - I_{ph} \quad (1.9)$$

Cas d'une cellule idéale

Le schéma électrique équivalent d'une cellule solaire idéale à jonction PN, peut être représenté par une diode (pour modéliser la jonction PN) et un générateur de courant continu, I_{ph} (pour modéliser le courant photogénéré), comme le montre la figure 1.9.

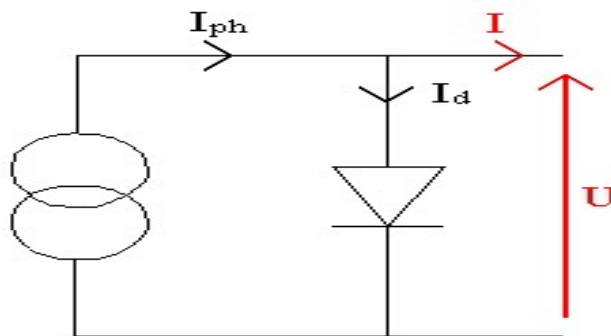


Figure 1.9: Schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque idéale à jonction PN [22]

Cas d'une cellule réel

La performance d'une cellule solaire réelle est limitée par l'influence de deux phénomènes physiques assimilables à deux résistances R_s et R_p (Figure 1.10).

R_s : Résistance série, due essentiellement aux pertes par effets Joule à travers les grilles de collectes et la résistance propre des semi conducteurs, ainsi qu'aux mauvais contacts (semiconducteur, électrodes).

R_p : Résistance parallèle, dite 'Shunt' (R_{sh}) provient des pertes par recombinaisons dues essentiellement à l'épaisseur, aux effets de surface, ainsi qu'à la non idéalité de la jonction.

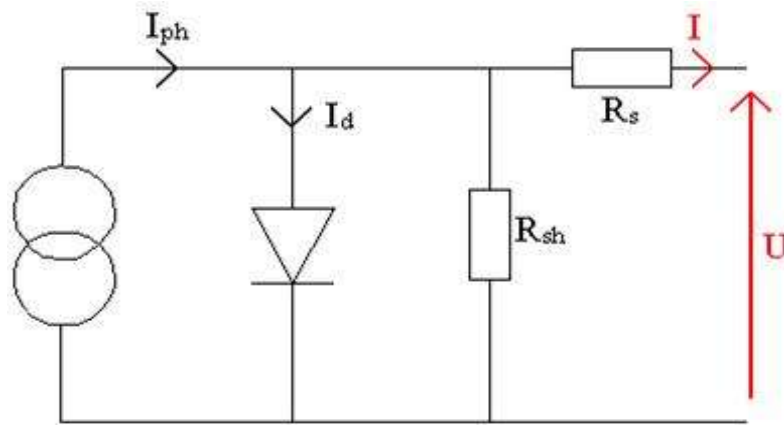


Figure 1.10: Schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque réelle [22]

Selon le schéma équivalent d'une cellule solaire dans la figure 1.9, on a :

$$I = I_{ph} - I_d -$$

$$\left(\frac{U+IR_s}{R_{sh}}\right) \quad (1.10)$$

$$I = I_{ph} - I_s \left[\exp\left(\frac{U+IR_s}{nV_{th}}\right) - 1 \right] -$$

$$\frac{U+IR_s}{R_{sh}} \quad (1.11)$$

Avec :

I_s le courant de saturation [A]

R_s la résistance série du circuit [Ω]

R_{sh} la résistance parallèle du circuit [Ω]

n le coefficient d'idéalité de la diode.

I_{ph} le courant photogénéré [A]

V_{th} : le potentiel thermique en Volt (V) ; il est donné par :

$$V_{th} = \frac{KT}{q} \quad (1.12)$$

Où

K : la constante de Boltzmann (1.38066×10^{-23} J/K), T : la température absolue en Kelvin (K)

et q : la charge absolue d'un électron en coulomb (1.60281×10^{-19} C).

1.7.2 Paramètres caractéristiques d'une cellule solaire

Les principales grandeurs permettant de quantifier les performances d'une cellule photovoltaïque peuvent être extraites à partir de la caractéristique I-V, représentée schématiquement sur la Figure 1.11. Il est possible de déduire de cette caractéristique les grandeurs suivantes que nous allons décrire séparément: I_{cc} , V_{co} , I_m , V_m , FF et η .

1.7.2.1 Courant de court-circuit (I_{cc})

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

1.7.2.2 Tension de circuit ouvert (V_{co})

La tension de circuit ouvert V_{co} , est la tension mesurée lorsqu'aucun courant ne circule dans le dispositif photovoltaïque. Elle dépend essentiellement du type de cellule solaire (jonction p-n, jonction Schottky), des matériaux de la couche active et de la nature des contacts couche active-électrode. Elle dépend de plus de l'éclairement de la cellule. A partir de l'expression du courant total de la cellule sous illumination, équation 1.13 dans le cas d'un courant nul, on obtient son expression :

$$V_{CO} = \frac{KT}{q} \log \left[\frac{I_{ph}}{I_s} + 1 \right] \quad (1.14)$$

1.7.2.3 Valeurs I_{max} et V_{max}

Les valeurs I_{max} et V_{max} sont définies de telle sorte que le produit $I_{max} \cdot V_{max}$ soit maximal. Ce dernier correspond à la puissance maximale P_{max} pouvant être délivrée par la cellule photovoltaïque.

$$V_{max} = V_{CO} - \frac{KT}{q} \log \left(1 + \frac{qV_{max}}{KT} \right) \quad (1.15)$$

et

$$I_{max} = I_{ph} - I_0 \left(\exp \left(\frac{q}{KT} (V_{max} + R_s I_{max}) \right) - 1 \right) - \frac{V_{max} + R_s I_{max}}{R_{sh}} \quad (1.16)$$

1.7.2.4 Facteur de forme (FF)

Le facteur de forme FF de la cellule peut également renseigner du vieillissement de la cellule. C'est le rapport entre la puissance maximale débitée $V_{max} \cdot I_{max}$ et le produit de la tension en circuit ouvert avec le courant de court-circuit, on le note [23]:

$$FF = \frac{P_{max}}{P_{opt}} = \frac{I_{max} \cdot V_{max}}{I_{cc} \cdot V_{oc}} \quad (1.17)$$

Le paramètre FF est le facteur de remplissage ou facteur de forme. Il mesure le caractère rectangulaire de la courbe $I(V)$. Une illustration de ce facteur de forme est donnée à la figure 1.11.

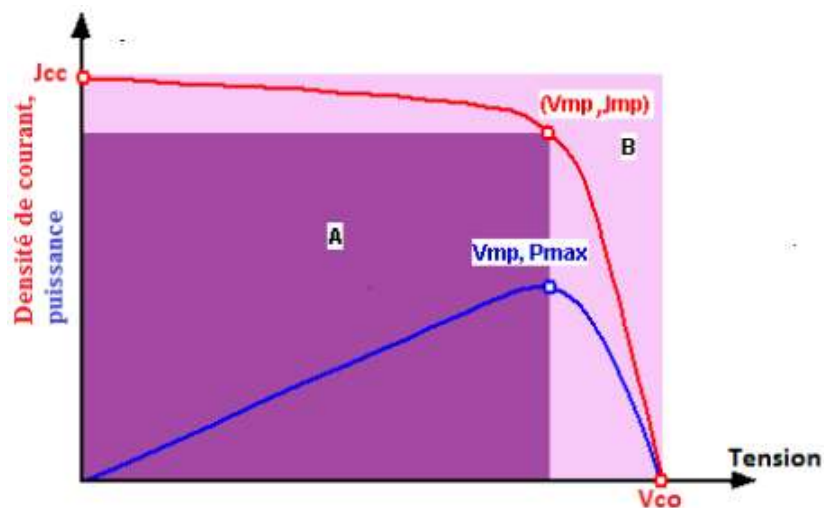


Figure 1.11 : Le facteur de forme dans la courbe $I(V)$ [24]

1.7.2.5 Rendement de conversion (η)

Le rendement η est le paramètre le plus utilisé pour l'étude des performances des cellules solaires. Il exprime le rapport de la puissance maximale disponible à la puissance du rayonnement incident. Ce rendement est lié au facteur de forme par l'équation 1.12: [25, 26]

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_{in}} = FF \cdot \frac{V_{oc} \cdot I_{cc}}{P_{in}} \quad (1.18)$$

P_{in} : la puissance incidente de la lumière est égale à la puissance solaire $P_{solaire}$ ($P_{solaire} = 1000 \text{ W/m}^2$)

Ce rendement peut être amélioré en augmentant le facteur de forme, le courant de court-circuit et la tension en circuit ouvert.

D'autre part, comme toutes les charges générées ne peuvent pas être collectées aux bornes des électrodes, la cellule n'atteint pas son maximum d'efficacité. On introduit alors le paramètre rendement quantique externe afin de mieux évaluer l'efficacité d'une cellule solaire. Cette grandeur correspond à la réponse spectrale de la cellule.

1.7.2.6 Rendement quantique externe EQE (External Quantum Efficiency)

Le rendement quantique externe mentionné aussi sous l'abréviation IPCE (Incident-Photon Conversion Efficiency) correspond au rapport entre le nombre d'électrons collectés en court-circuit et le nombre de photons incidents. Il est donné par l'équation 1.19 :

$$EQE = \frac{J_{cc}(\lambda) E_{ph}(\lambda)}{\varphi(\lambda) q} = \frac{J_{cc}(\lambda) hc}{\varphi(\lambda) q\lambda} \quad (1.19)$$

Où J_{cc} est la densité de courant de court-circuit, φ est le flux lumineux incident et E_{ph} l'énergie du photon donné par:

$$E_{ph} = \frac{hc}{\lambda} \quad (1.20)$$

Avec :

h : Constante de Planck

c : Célérité de la lumière dans le vide

λ : Longueur d'onde

1.7.2.7 Rendement quantique interne IQE (Internal Quantum Efficiency)

En tenant compte des pertes par réflexion et du nombre de photons réellement absorbés, nous obtenons le rendement quantique interne IQE (Internal Quantum Efficiency) donné en première approximation par le rapport EQE sur le spectre d'absorption (Equation 1.21)

$$IQE = \frac{\text{nombre d'électrons collectés}}{\text{nombre de photons incidents réellement absorbés}} = \frac{EQE(\lambda)}{A(\lambda)} \quad (1.21)$$

La figure 1.12 représente le rendement quantique externe d'une cellule à base de silicium cristallin.

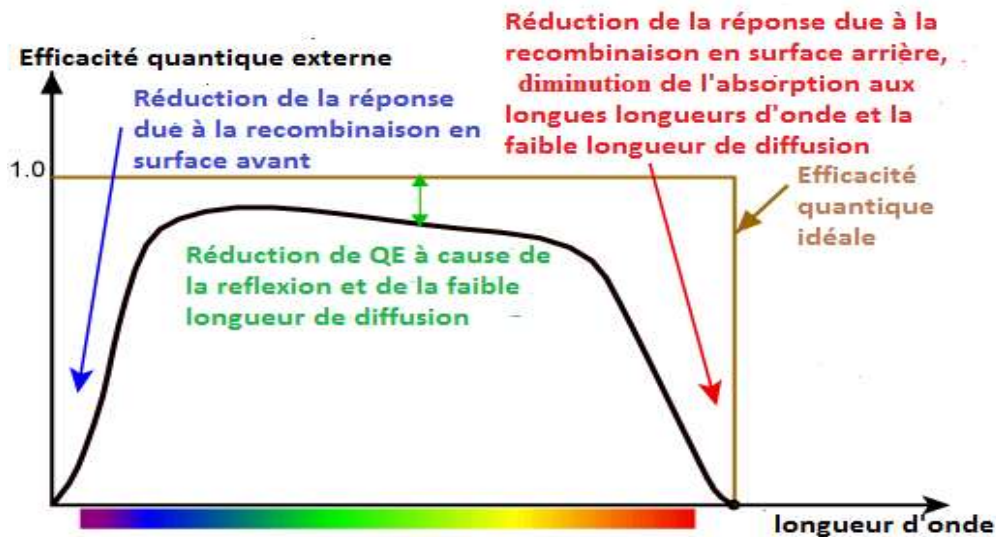


Figure 1.12 : Courbe explicatif du rendement quantique du silicium [27]

- Dans l'ultraviolet (pour $\lambda < 400$ nm), l'absorption est élevée et les paires électrons-trous seront générées dans les premiers nanomètres du silicium. Le rendement quantique externe est faible en raison de la recombinaison au voisinage de la surface (pour la face avant) et d'une importante réflectance du matériau silicium.
- Dans le visible et le proche infrarouge (pour $400 \text{ nm} < \lambda < 900$ nm), l'absorption est plus faible et la génération de porteurs sera répartie sur une plus grande profondeur du silicium. Le rendement externe est très élevé et atteint presque 100%.
- Dans l'infrarouge (pour $900 \text{ nm} < \lambda < 1100$ nm), l'absorption devient faible et la création de paires électrons-trous se fait à plusieurs centaines de micromètres dans la profondeur de la cellule. Cette partie de la réponse est liée à la face arrière (réflectivité, recombinaison) [28].
- Au-delà de l'énergie du gap (≈ 1100 nm), le taux de génération de pair électron-trou devient négligeable. Il est donc possible, grâce à l'évaluation du rendement quantique, de localiser plus précisément les sources limitant les performances de la cellule. Les facteurs qui réduisent le rendement quantique sont en général les recombinaisons en surface avant et arrière de la cellule, et la faible longueur de diffusion des porteurs. Il est donc important de passiver les surfaces d'une cellule pour réduire ces recombinaisons et ainsi réduire la perte de rendement [28].

1.8 Facteurs limitant le rendement

Les différents facteurs de pertes, sont dus soit aux bornes purement physiques liées au matériau, soit aux limitations technologiques induites par le processus de fabrication. Des choix de technologies appropriés peuvent cependant avoir des conséquences sur la limitation intrinsèque du matériau [29].

I.8.1. Pertes physiques

Les pertes physiques limitent le rendement de conversion théorique à environ 29 % (mesuré sous éclairement AM1,5G). Dans le cas des cellules photovoltaïques en silicium, les quatre principales causes de pertes physiques sont les suivantes :

a- L'absorption incomplète des photons

Les photons dont l'énergie est inférieure au gap du matériau, ne peuvent générer de paire électron/trou et ne sont donc pas absorbés par la cellule photovoltaïque, dans le cas du silicium ($E_{ph} < E_g \sim 1,12 \text{ eV}$). Ceci entraîne une perte d'environ 27% sur le rendement. (Zone A de la figure 1.13) [30]

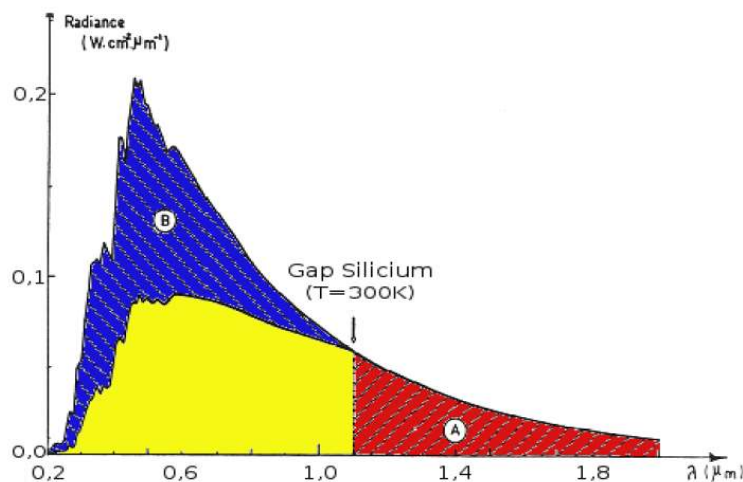


Figure 1.13 : Courbe de l'irradiante solaire en fonction de la longueur d'onde [29]

b- L'excès d'énergie des photons (thermalisation)

Les photons dont l'énergie est supérieure à celle de la bande interdite perdent l'énergie en excès par thermalisation, qui ne participent donc pas à la création de paires électron-trou. Cette perte représente environ 28% de pertes (Zone B de la (Figure 1.13)).

c- Le facteur de tension

La tension maximale de circuit ouvert V_{co} ne peut excéder la valeur (E_g / q) , à savoir environ 1,12 V. Les recombinaisons Auger limitent également la valeur de V_{co} à des valeurs comprises entre 680 mV et 720 mV pour des cellules photovoltaïques en silicium à haut rendement [31].

d- Le facteur de forme

La puissance maximale pouvant être générée par une cellule n'est pas égale au produit du courant de court-circuit I_{cc} par la tension de circuit ouvert V_{co} , auquel cas le FF vaudrait 1. En effet, le courant varie exponentiellement avec la tension en raison des courants de recombinaison limitant FF à 89 %.

Ces deux facteurs physiques (facteurs (a) et (b)) étant considérés comme invariables, les facteurs technologiques tels que la réflectivité et le rendement de collecte prennent alors une part importante dans l'objectif d'améliorer le rendement de la cellule solaire.

1.8.2 Pertes technologiques

a. Réflectivité

Une partie de l'énergie incidente est réfléchiée par la surface (non métallique) de la cellule. Le coefficient de réflexion R peut être optimisé par la mise en œuvre des traitements de surface adéquats et de couche antireflet.

b. Taux d'ombrage

Les contacts métalliques (de surface $S_{m\acute{e}tal}$) présents sur la face avant afin de collecter les porteurs entraînent des pertes de puissance puisqu'ils couvrent une partie de la surface S de la cellule. Le taux d'ombrage est un compromis entre les pertes dues à la couverture partielle de l'émetteur par les contacts et les pertes de facteur de forme provoquées par la résistance série, liée à la largeur de la métallisation

c. Rendement d'absorption

Le rendement d'absorption a une partie des photons qui bien qu'ayant l'énergie nécessaire traversent l'épaisseur (e) de la cellule mais ils vont être non absorbés. Ce terme devient important quand la cellule est très fine ($< 100\mu m$) conduisant à des pertes par transmission. Ceci peut être minimisé en utilisant une couche réfléchissante sur la face arrière de la cellule (réflecteur arrière) [30].

d. Rendement de collecte

Le rendement de collecte correspond au rapport entre le nombre de porteurs de charge effectivement collectés et le nombre total de porteurs photogénérés. Ce terme tient donc compte des recombinaisons de porteurs survenant dans le volume et en surface de la cellule, et il dépend directement de la durée de vie des porteurs survenant dans le volume et en surface de la cellule [22].

1.9 Les différentes technologies de cellule solaire

Une grande variété de cellules photovoltaïques existe, elles sont généralement classées en trois grandes familles [32, 33] :

- Les cellules de première génération : silicium cristallin (c-Si et polycristallin (Poly c-Si)).
- Les cellules de deuxième génération : silicium amorphe/ silicium micro-cristallin, cadmium- tellure et Cuivre-Indium-Gallium-Sélénium.
- Les cellules de troisième génération : cellule à concentration, cellules à colorants, les cellules organiques et les nouveaux concepts de cellules solaires.

Dans ce paragraphe, nous allons présenter brièvement les spécificités de chacune de ces familles.

1.9.1 Cellules solaires de la première génération

Les cellules de la première génération sont basées sur une seule jonction p-n et sont généralement constituées de silicium [34] jouant le rôle du matériau semiconducteur d'une épaisseur d'environ de la 20 μm . ce matériau est l'un des plus abondants de la croûte terrestre.

On distingue deux types de cellules :

- Les cellules en silicium monocristallin, pour lesquelles on obtient des rendement de conversion photovoltaïques record proche de 25% [35, 36].
- Les cellules en silicium polycristallin, pour lesquelles les rendements sont de 20% [37]. Ces cellules sont réalisées à partir des résidus de l'industrie électronique sous forme de lingots refroidis axialement puis découpés en plaquettes minces et débarrassés de leurs défauts recombinants par diffusion de phosphore ou d'aluminium (Figure 1.14). le rendement de conversion de ce type de cellules est inférieur à celui de cellules monocristallines mais leur fabrication est légèrement moins coûteuse.

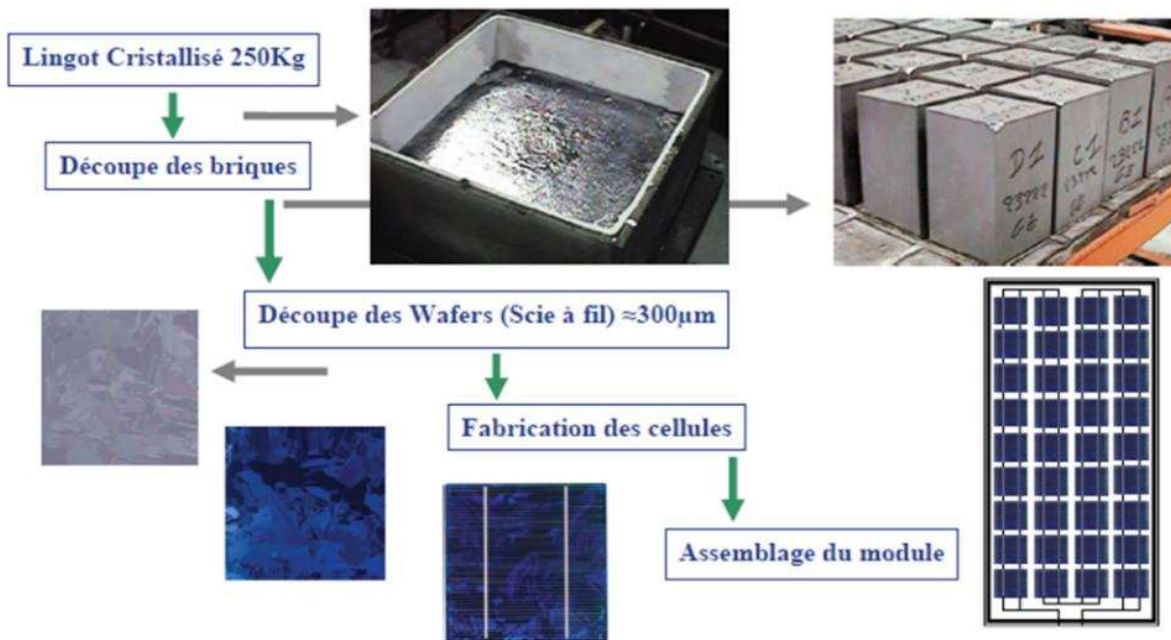


Figure 1.14: Processus de fabrication de panneaux photovoltaïques (CZ :Czochralski)[28]

Cette génération domine actuellement le domaine du photovoltaïque et est même en progression, elle passe de 88% en 2012 [38] à 92% de part de marché en 2014 (figure 1.15 à [33]).

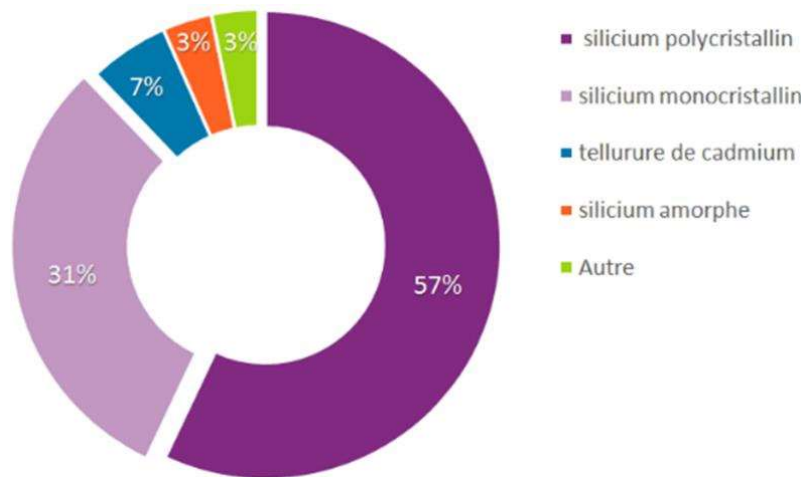


Figure 1.15 : Répartition en pourcentage de la production des cellules par filière en 2015 [39]

1.9.2 Cellules solaires de la seconde génération

Les couches minces inorganiques constituent la seconde génération de la technologie photovoltaïque. En effet, depuis la découverte des propriétés photovoltaïques du silicium amorphe au milieu des années 1970 [40] une intense activité de recherche motivée par la production des coûts de fabrication des cellules a été déployée dans le domaine des couches minces [41].

Le principe de ces cellules est d'utiliser un matériau absorbeur ayant un coefficient d'absorption optique supérieur à celui du silicium cristallin. Dans cette optique l'utilisation des matériaux à gap direct est généralement favorisée et permet dans la pratique d'atteindre des épaisseurs actives beaucoup plus fines, de l'ordre de 1 à 10 μm d'épaisseur. Ces couches minces sont généralement déposées sur des substrats bas coûts : verre, polymère ou métal. Cette génération permet donc de diminuer les coûts de production des dispositifs en réduisant la quantité de matières premières utilisées et en exploitant des procédés de fabrication moins chers [28]. Les matériaux photo-actifs les plus utilisés en couches minces sont le silicium amorphe (a-Si), le Tellure de Cadmium (CdTe) et le CIGS (Cuivre Indium Gallium Sélénium) [42].

1.9.2.1 Silicium amorphe (a-Si)

Le silicium amorphe est déposé sur une feuille de verre. D'ailleurs depuis les années 1970 les chercheurs essaient d'utiliser du silicium non cristallisé à son état amorphe, car ce dernier présente beaucoup d'avantages particulièrement, sa capacité d'absorption, son bon fonctionnement sous faible éclairage contrairement au silicium cristallin, sa facilité à être déposé sur les grandes surfaces et sa faible consommation d'énergie. Malheureusement il s'avère que ces "couches minces" ont un rendement bien inférieur à celui des filières cristallines (6%), leur utilisation mondiale est d'à peine plus de 3%, en revanche leur coût est proportionnellement plus économique. La première filière "couche mince" a souffert d'une diminution assez rapide de ses performances au cours du temps (dégradation rapide du rendement), mais actuellement, ces problèmes sont corrigés. Leur utilisation est prioritairement limitée pour les toutes petites puissances nécessaires aux objets portables (montres, calculatrices ...) et pour fabriquer des modules plus ou moins souples [43, 44].

La réalisation des couches minces se fait assez souvent à partir d'un composé de matériaux. Ces composés sont aussi appelés les chalcogénures, dans ce qui va suivre nous allons voir les deux types les plus connus qui sont: CdS-CdTe (Tellure de Cadmium) et CIS (Sélénure de Cuivre Indium).

1.9.2.2 Cellule à base de tellure de cadmium

Jusqu'à présent, la cellule à base de CdTe (Tellure de Cadmium) est considérée comme l'approche la plus prometteuse pour le photovoltaïque terrestre, du fait de ses propriétés optiques optimales. Elle se caractérise par une bande interdite directe de 1,45 eV parfaitement adaptée au spectre solaire, en outre son très grand coefficient d'absorption fait que la quasi-totalité du spectre est absorbée sur une profondeur de 2 μm , néanmoins les problèmes d'environnement associés à l'utilisation du cadmium ont largement freiné les tentatives de développement dans cette filière. [44, 45]

1.9.2.3 Cellule à base de sélénure de cuivre indium

Doté d'un coefficient d'absorption 100 à 1000 fois plus grand que celui du silicium cristallin, une épaisseur de 1,5-2 μm est suffisante pour absorber la partie utile du spectre solaire. Le matériau CIS (Sélénure de Cuivre Indium) est aussi considéré comme un des plus prometteurs. Ce composé de type I-III-VI et de structure chalcopyrite, présente un rendement théorique des plus élevés parmi les couches minces qui se situe autour de 25%, avec à un plus cher coût de fabrication, cependant il a une faible bande interdite (1,02 eV) comparé au cadmium. Aussi, les travaux sur les cellules solaires à base de CIS se font désormais sur des alliages quaternaires $\text{Cu}(\text{InGa})\text{Se}_2$ (CIGS). Qui ont récemment atteint des rendements record de 18,8% en laboratoire. En outre, avec des alliages d'InGaN on aura une bande interdite plus large que celle de CIS grâce à l'introduction du Ga, qui se substitue partiellement à In. [45,46]

1.9.3 Les cellules solaires de la troisième génération

Cette troisième génération de cellule solaire est encore au stade de la recherche. Cependant, leur développement est très actif et motivé par les applications spatiales vu qu'elles visent principalement à obtenir le plus haut rendement jamais obtenu auparavant, mais en plus à minimiser les inconvénients et les obstacles rencontrés dans les générations précédentes telles que coût de fabrication très élevé, la disponibilité des matériaux ou bien leurs toxicités. Ce genre de cellule aux perspectives très prometteuses offre bel et bien la possibilité de répondre à ces problématiques dans un avenir proche [47]. Dans cette optique, différents concepts sont mis en œuvre dont les 4 principaux, décrits ci-dessous, sont les cellules solaires à concentration, les cellules à colorants, les cellules organiques et les nouveaux concepts émergents. [48]

1.9.3.1 Cellules solaire à Concentration

Le solaire photovoltaïque « à concentration » consiste à capter le rayonnement solaire grâce à un pavage d'optiques (lentilles ou miroirs) de faible coût pour le concentrer sur une surface beaucoup plus réduite (de un centième- concentration basse à 1 millième- concentration haute) où l'on place une cellule solaire de petite dimension à hautes performances. [28]

L'empilement des matériaux photoélectriques III-V (As, Ga, In, P, B) constituant les cellules à hautes performances est tel que le spectre du rayonnement solaire converti en énergie électrique est plus étendu que dans les cellules photovoltaïques à silicium (IV). Pour un même flux solaire capté, les rendements énergétiques atteints aujourd'hui (30% à 40% pour l'ensemble lentille et capteur) sont doubles de ceux des panneaux solaires photovoltaïques à insolation directe (autour de 10% et jusqu'à 20%). Le potentiel de ces structures permet d'espérer atteindre à terme un rendement de conversion du flux solaire en énergie électrique supérieure à 40%. [49]

Les dispositifs de raccordement multiple commercialisés et fabriqués par Sharp et d'autres entreprises [48] ont des rendements de près de 35% (nettement plus élevés que les cellules solaires en silicium cristallin mono-jonctions). Néanmoins, les systèmes de concentration requièrent des coûts de fabrication élevés et un pointeur solaire pour que les rayons du soleil convergent en permanence vers le capteur. De plus, ils sont incapables à fournir de l'énergie dans des conditions de lumière diffuse.

1.9.3.2 Cellules nanocristallines à colorant (cellules de Grätzel)

Appelé aussi cellules de Grätzel par rapport à leur inventeur Michael Grätzel, ces cellules sont composés d'un oxyde semi-conducteur inorganique. Généralement, on utilise l'oxyde titane pour son large gap de 3.2 eV, avec un électrolyte liquide dans lequel l'oxyde semi-conducteur est noyé et un colorant organique qui sert d'absorbeur de photon. Ce type de cellules ont un principe de fonctionnement totalement différent des autres cellules, une fois que le colorant gagne assez d'énergie grâce au photon absorbé ce dernier va émettre un électron à l'électrode en platine de la bande de conduction d'oxyde semi-conducteur qui va régénérer par la suite le colorant oxydé [44, 47]. Les cellules nanocristallines se caractérisent par leur longue durée de vie et leurs stabilités au fil des années, en plus leur simple fabrication qui ne nécessite pas de grandes installations comme il est le cas pour les cellules inorganiques. Actuellement, ce genre de cellules représente les meilleurs rendements dans la catégorie des cellules solaires de troisième génération avec un rendement en laboratoire de 11.9%, obtenu par la société Sharp.

D'ailleurs elles seront les premières cellules de troisième génération à être commercialisées dans un futur proche. Cependant, comme pour toutes les cellules solaires celles-là aussi présentent un inconvénient au niveau de l'électrolyte liquide, il s'agit des fuites. Les chercheurs ont remplacé cet électrolyte liquide par un solide. Malheureusement, ça n'a pas donné d'aussi bons résultats que sur sa première forme. [47]

1.9.3.3 Cellules solaires organiques

Les cellules photovoltaïques organiques sont des cellules photovoltaïques dont au moins la couche active est constituée de molécules organiques. Il en existe principalement deux types:

- Les cellules photovoltaïques organiques moléculaires.
- Les cellules photovoltaïques organiques en polymères

Apparues dans les années 1990, ces technologies ont pour but de réduire le coût de production de l'électricité. Les cellules photovoltaïques organiques bénéficient du faible coût des semi-conducteurs organiques et des simplifications potentielles dans le processus de fabrication. Elles offrent la perspective d'une production en continu (roll-to-roll) qui pourrait réduire drastiquement le prix de revient des panneaux solaires. [50]

Pratiquement, ces technologies ne sont utilisées commercialement aujourd'hui que dans le secteur de l'électronique de consommation (chargeur de GSM/ baladeur MP3) où la durée de vie de la cellule et du produit associé sont approximativement égales (2 ans). En améliorant la durée de vie ou en réduisant les coûts de production, d'autres applications devront voir le jour dans les années à venir. Encore au stade de recherche expérimentale, le record de rendement est compris entre 4 et 5% en laboratoire. Avant une possible commercialisation, des avancées concernant l'efficacité et l'encapsulation doivent encore être réalisés. [50]

1.10 Les constituants de base d'une cellule photovoltaïque

Bien que différentes structures soient envisageables pour l'élaboration des cellules photovoltaïques, des parties similaires sont présentes dans chaque composant. La structure d'une cellule photovoltaïque avec contacts sur les deux faces est présentée sur la figure 1.16

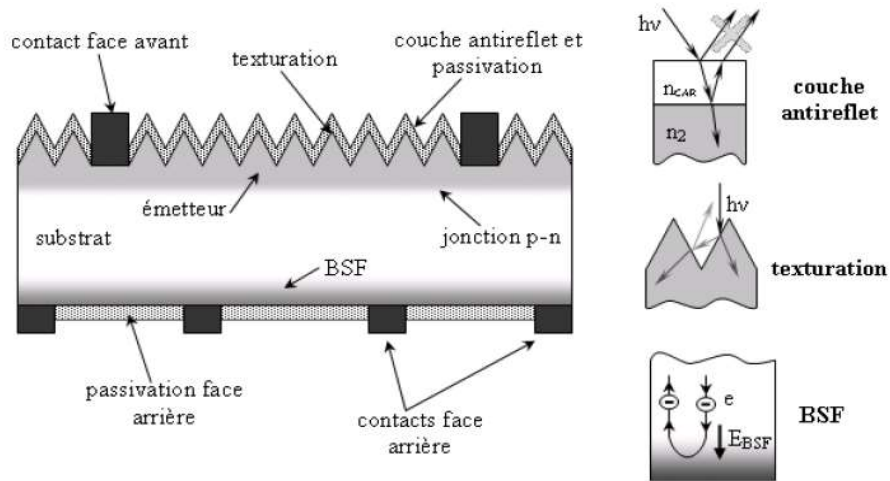


Figure 1.16: Composition d'une cellule photovoltaïque [51]

1.10.1 Passivation des faces avant et arrière

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

1.10.2 Couche antireflet

Pour minimiser la réflexion de la lumière, une couche antireflet (CAR) est utilisée. Le principe d'action des couches antireflet est basé sur l'interférence des faisceaux lumineux dans les couches diélectriques minces (voir insertion sur la figure 1.17). Si l'épaisseur de la couche diélectrique est égale à :

$$d_{CAR} = \frac{(2N + 1)\lambda}{4 \cdot n_{CAR}}, \quad N = 1,2,3,4 \dots \quad (1.22)$$

On obtiendra l'annulation des faisceaux réfléchis à l'interface air/CAR et CAR/Semiconducteur. Pour les cellules photovoltaïques à haut rendement, une double couche antireflet est utilisée (avec deux diélectriques différents).

Différentes CAR sont utilisées en photovoltaïque : TiO_2 , SiO_2 , ZnS , MgF_2 , SiN_x , etc . [52]

1.10.3 Texturation de la surface

La réflexion est à l'origine de pertes importantes pour la cellule. La texturation est utilisée pour diminuer la réflectivité de la surface de la cellule. Cette opération vise à développer en surface un relief micrométrique, généralement de forme pyramidale (Figure 1.15). Le relief créé permet d'augmenter le parcours des rayons en induisant des réflexions multiples sur les facettes des pyramides. La texturation assure ainsi le piégeage d'un maximum de lumière réduisant les pertes liées à la réflectivité. Différents procédés sont utilisés pour réaliser la texturation : attaque chimiques de la surface (KOH, NaOH, acides), texturation mécanique, plasma ou laser. Ces méthodes peuvent faire passer la réflectivité effective de 39% à moins de 10%.

1.10.4 Contacts face avant et arrière

Les contacts constituent la structure de collecte qui récupère et envoie les porteurs photogénérés vers le circuit externe. Pour assurer efficacement ce rôle, les contacts doivent être ohmiques. De mauvais contacts, c'est à dire entraînant une forte résistance série, auront essentiellement une répercussion sur le facteur de forme de la cellule et sur le courant récupéré.

1.10.5 BSF

Le champ électrique arrière (BSF : Back Surface Field) consiste à créer une barrière de potentiel (par exemple, jonction p+/p) sur la face arrière de la cellule pour assurer une passivation. La barrière de potentiel induite par la différence de niveau de dopage entre la base et le BSF tend à confiner les porteurs minoritaires dans la base (voir l'insertion sur la figure 1.15). Ceux-ci sont donc tenus à l'écart de la face arrière qui est caractérisée par une vitesse de recombinaison très élevée. Le BSF fait encore l'objet de nombreuses recherches car l'épaisseur des plaques est constamment réduite afin de réaliser une économie de matière première et le silicium multicristallin présente désormais des porteurs minoritaires élevés (environ 200 μm pour le Polix). [53]

1.11 Structure d'une cellule photovoltaïque à haut rendement (PERL)

La structure de la cellule photovoltaïque à haut rendement en silicium monocristallin est présentée sur la figure 1.17. Cette cellule a été élaborée en laboratoire avec des procédés de la microélectronique en utilisant la technologie PERL (Passivated Emitter with Rear Locally diffused). [54, 55]

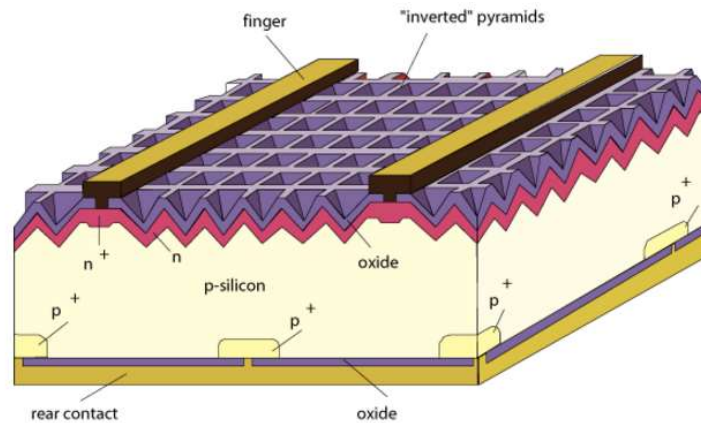


Figure 1.17: Cellule solaire à haut rendement PERL [56]

Plusieurs éléments clés ont été utilisés dans la structure PERL. La face avant est texturée en pyramides inversées ce qui permet une réduction de la réflectivité plus importante que la structure obtenue avec une attaque chimique. Les grilles de contact ont une surface réduite ce qui offre l'avantage de diminuer l'ombrage formé par ces grilles et donc d'augmenter la transmission de la lumière dans la cellule.

Une fine couche d'oxyde thermique est formée sur l'émetteur pour diminuer les recombinaisons, on parle de passivation de surface. Sur la face avant, une double couche antireflet est déposée afin d'optimiser la transmission.

Le principe de l'émetteur sélectif a été utilisé. Le dopage est élevé uniquement sous les contacts et plus faible ailleurs. Ceci permet de réduire les recombinaisons à la surface et dans l'émetteur mais d'assurer un bon contact avec le métal.

La face arrière est également passivée par de l'oxyde thermique. La zone près des contacts métalliques à l'arrière de la cellule est fortement dopée pour réaliser le BSF et assurer un bon contact électrique.

Les dopages des faces avant et arrière sont réalisés par implantation ionique, ce qui permet un très bon contrôle des profils de dopants.

La structure PERL est très intéressante parce qu'elle a permis de valider un certain nombre d'hypothèses et de procédés mais comporte beaucoup d'étapes et utilise des technologies de la microélectronique ce qui semble incompatible avec une fabrication à un coût raisonnable. L'industrie photovoltaïque s'emploie actuellement à utiliser certaines de ces améliorations pour augmenter les rendements sans trop augmenter les coûts de production. [57]

1.12 Conclusion

Dans ce premier chapitre nous avons présenté l'état d'art de la technologie photovoltaïque en commençant par quelques notions sur le spectre solaire et des généralités sur le photovoltaïque, puis nous avons fait une étude détaillée de la cellule solaire en passant par tous les axes nécessaires pour la compréhension de cette technologie comme sa structure, son principe de fonctionnement avec ces équations physiques qui définissent ces paramètres. Nous avons également discuté des différentes caractéristiques physiques des cellules photovoltaïques, les paramètres limitant leur rendement et leur coût, ainsi que les différentes matériaux et filières photovoltaïques. Finalement, nous avons fait en résumé, les constituants de base d'une cellule photovoltaïque.

Références bibliographiques Chapitre 1

- [1] K. Mertens, « Photovoltaics: fundamentals, technology and practice », first edit. John Wiley & Sons Ltd, ed, United Kingdom, (2014).
- [2] W. Shockley « The theory of pn junctions in semiconductors and pn junction transistors». Bell Syst. Tech. J., 28.3, pp.435–489, (1949).
- [3] D. M. Chapin, C.S. Fuller & G.L. Pearson, « A new silicon p-n junction photo-cell for converting solar radiation into electrical power ». Journal of Applied Physics, 25(5), pp.676–677, (1954).
- [4] A. Mekemeche « Modélisation à deux dimensions des propriétés physiques de cellules solaires au silicium à base de substrat de type n. Étude de quelques cas particuliers de cellules innovantes », Thèse de doctorat, Université Mostaganem (2017).
- [5] Kh. Djeriouat « Optimisation du rendement des cellules photovoltaïques à hétérojonctions: GaInP/GaAs », Mémoire de Magister, Université de Abou-Bakr Belkaïd-Tlemcen, Algérie, (2011).
- [6] National Center for Photovoltaics NREL. Best research-cell efficiencies. 2020.
- [7] American Society for Testing ASTM & Materials. Solar spectral irradiance: Air mass 1.5. 2017.
- [8] C. Honsberg, S.Bowden « Photovoltaics: Devices, Systems and Applications » [CDROM]. Sydney (Aus): Univ. of New South Wales, (1998).
- [9] A. Hichem, « Propriétés électriques de cellule solaire à base de diSéléniure de Cuivre Indium Galium $\text{CuIn}_{(1-x)}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ (CIGS) », Thèse de magister, Université Mohamed Khider Biskra, Année 2014 (2014)
- [10] A. Chovet and P. Masson. Physique des SemiConducteurs, (2005).
- [11] T. Desrues « Développement de cellules photovoltaïques à hétérojonctions silicium et contacts en face arrière », Thèse de doctorat, INSA de Lyon, (2009).
- [12] M. Zanucoli. « Advanced numerical simulation of silicon based solar cells », Thèse de doctorat, Université de Bologne, (2012).
- [13] F. Khaled « Effet de l'électrode de transparente sur les propriétés des cellules solaires en hétéro jonction à base de silicium », Thèse de doctorat, Université de Batana 2, (2018).
- [14] V. Jordi. « Effets de la compensation du dopage sur les propriétés électriques du silicium et sur les performances photovoltaïques des cellules à base de silicium solaire purifié par voie métallurgique ». Thèse de doctorat, INSA de Lyon, (2011).

- [15] P.P. Altermatt, J. Schmidt, G. Heiser, A.G. Aberle, « Assessment and parameterization of Coulomb enhanced Auger recombination coefficients in lowly injected silicon », *J.Appl.Phys.*82 4938-4944 (1997).
- [16] M. J. Kerr, A. Cuevas, « General parameterization of Auger recombination in crystalline silicon », *J.Appl. Phys.* 91, 2473-2480 (2000).
- [17] M. Haelterman. *Physique des semiconducteurs II.* (1998).
- [18] R.N. Hall, « Electron-hole recombination in germanium », *Phys Rev.*87, 387 (1952).
- [19] M.A. Green, *Solar Cells*, « The University of New South Wales », Kinsington, UNSW (1998)
- [20] R. Mechouma « Contribution à l'étude des onduleurs dans les systèmes photovoltaïques: Applications pour les charges commerciales », Thèse de doctorat, Université Mustapha Ben Boulaid- Batna 2 (2015).
- [21] N.Oleksiy « Simulation, fabrication et analyse de cellules photovoltaïques à contacts arrière interdigités », Thèse de doctorat, L'institut national des sciences appliquées de Lyon (2005).
- [22] A. ADAINE « Optimisation numérique de cellules solaires à très haut rendement à base d'InGaN », Thèse doctorat, Université de Lorraine- École Doctorale Énergie Mécanique Matériaux (2018).
- [23] H. Matieu, « Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques », 1ère édition, DUNOD, Paris, (2001).
- [24] M.A. Green. Solar cell fill factors: General graph and empirical expressions. *Solid State Electronics*, 24, 788-789 (1981).
- [25] J.M. Nunzi, « Organic photovoltaic material and devices ». *C. R. Physique* 3 (2002) 523-542.
- [26] S. Gunes, H. Neugebauer, N. S. Sariciftci, « Conjugated Polymer-Based Organic Solar Cells » *Chem. Rev.*, 107 (4), 1324 (2007).
- [27] [http:// www.pveducation.org/pvcdrom/solar-cell-operation/quantum-efficiency](http://www.pveducation.org/pvcdrom/solar-cell-operation/quantum-efficiency)
- [28] O.I Elmi, « Nouvelles structures de cellules solaires à base de silicium: Texturation, passivation et association de réseaux de nanostructures métalliques avec une couche Down-Conversion ». Thèse de doctorat, Université de Lille 1 Sciences et Technologies, (2017)
- [29] R. Bestam « Modélisation et Simulation d'une Structure à base de Semiconducteur III-V pour le Photovoltaïque », Université Saad dahleb de Blida, (2012).

- [30] C. Boulord, « développement de techniques de métallisation innovantes pour Cellules photovoltaïques à haut rendement », Thèse de doctorat en Dispositifs de l'Electronique Intégrée, L'institut national des sciences appliquées de Lyon. (2011).
- [31] J. Szlufcik, S. Sivoththaman, J. Nlis, R. Mertens, and R. Van Overstraeten, « Low-cost industrial technologies of crystalline silicon solar cells », Proceedings of the IEEE, vol. 85, no. 5, pp. 711–730, (2002).
- [32] A. M. Bagher, M. M. A. vahid, M. Mohsen « Types of Solar Cells and Application » American Journal of Optics and Photonics, 2015, 3(5): 94-113.
- [33] S. Sharma, K. K. Jain, A. Sharma, « Solar Cells: In Research and Applications ». A Review, Materials Sciences and Applications, 2015, 6, 1145-115.
- [34] International renewable Energy Agency (IRENA). Solar photovoltaics. Technical Report 4, (2012).
- [35] Daily: University of New South Wales, « Highest Silicon Solar Cell efficiency Ever Reached » Science Daily, 24 Oct 2008.
- [36] J. Zhao, A. Wang, M.A. Green, F. Ferrazza, « Novel 19.8% efficient honeycomb » textured multicrystalline and 24.4% monocrystalline silicon cells », Appl. Phys. Lett. 73, 1998, p. 1991.
- [37] O. Schultz, S. W. Glunz, G.P. Willeke, « Multicrystalline silicon solar cells exceeding 20% efficiency », Prog. Photovolt: Res. Appl. 12, 2004, 553.
- [38] European Photovoltaic Industry Association (EPIA). Global market outlook for photovoltaics 2013-2017. Technical report, 2013.
- [39] http://atlante.fr/blog/la-perovskite-la-pierre-philosophale-du-photovoltaique/#_ftn2
- [40] J. yang, A. Banerjee, S. Guha « Triple-junction amorphous silicon alloy solar cell with 14.6% initial and 13.0% stable conversion efficiencies », Appl. Phys. Lett., 1997, 70, 2975.
- [41] W. E. Spear; P. G. Le Comber « Substitutional doping of amorphous silicon » solid State Comm., 1975, 17, 1193-1196.
- [42] International Renewable Energy Agency (IRENA). Solar photovoltaics. Technical Report 4, 2012.
- [43] L. Bailly, « Cellules photovoltaïques organiques souples à grande surface » Thèse de doctorat. Université Sciences et Technologies-Bordeaux I, 2010.
- [44] M. MIMOUNE, « Étude des capteurs photovoltaïques basés sur les nanotechnologies » Thèse magister à L'université du Québec à Trois-Rivières, 2016.
- [45] C. Roger, « Développement de cellules photovoltaïques à base de CIGS sur substrats métalliques », Thèse de doctorat. Université de Grenoble, 2013.

- [46] Z. A. Latif, N. A. M. Zaki, and S. A. Salleh, « GIS-based estimation of rooftop solar photovoltaic potential using LiDAR », in Signal Processing and its Applications (CSPA), 2012 IEEE 8th International Colloquium on , 2012, pp. 388-392.
- [47] M. Abdelhak, « Etude et identification paramétrique d'une cellule photovoltaïque organique », Université El Hadj Lakhdar de Batna, 2011.
- [48] International Renewable Energy Agency (IRENA), Solar photovoltaics. Technical Report 4, (2012).
- [49] International Energy Agency (IEA). PV technology roadmap. Technical Report, 2010.
- [50] A. Abaidia et A. Dahmane, « Simulation d'une cellule solaire photovoltaïque à base d'hétérojonction : a-Si:H(n) /c-Si(p) », Mémoire Master Académique, Université Kasdi Merbah Ouargla, (2016).
- [51] A. Kaminski « Etude des étapes technologiques critiques dans la production des cellules solaires en silicium multicristallin ». Thèse de doctorat EEA. Lyon : INSA de Lyon, 167 p. (1997)
- [52] S. gall et al, « Semiconductors for solar cell application », Progression materials science, (1991), 205-418.
- [53] S. Oussidhom, « Etude comparative des performances des cellules solaires à jonctions simple et multiple », Thèse de Magister, Université de Tizi-Ouzou, (2015).
- [54] P. Fath, C. Borst et al. « Progress in a novel high-throughput mechanical texturization technology for highly efficient multicrystalline silicon solar cells. Solar En.Mat &Sol. Cells ». Vol. 48, pp. 229-236 (1997).
- [55] A. Rohatgi, V. Yelundur et al. « Aluminum-enhanced PECVD SiNx Hydrogenation in silicon ribbons ». 16 th E.C. Photovoltaic Solar Energy Conference., pp.1120-1123. Glasgow (UK), (2000).
- [56] J. Zhao, A. Wang, and M. A. Green, « Recent performance improvement of high efficiency PERL silicon solar cells ». Technical report, Photovoltaics Special Research Centre, University of New South Wales, Sydney, Australia, (2000).
- [57] D. Reaux, « Cellules photovoltaïques à hétérojonctions de silicium (a-Si:H/c-Si): modélisation des défauts et de la recombinaison à l'interface », Thèse de doctorat Université Paris- Saclay, (2017).

CHAPITRE 2

ETUDE DES MATERIAUX IV-IV SiGe

2.1 Introduction

Depuis une vingtaine d'années on assiste à un intérêt croissant au sujet de l'alliage silicium-germanium (SiGe) grâce à la possibilité de faire sur silicium de l'ingénierie de bande interdite. Ceci est d'autant plus important que cet alliage est compatible avec la technologie micro-électronique silicium qui est très bien maîtrisée et donc peu coûteuse. Un exemple d'application devenue commerciale est le transistor bipolaire à hétérojonction (HBT) [1] Des détecteurs infrarouges à base de SiGe ont aussi été développées [2]. De nombreux autres dispositifs sont en cours d'étude et de développement actuellement.

Depuis quelques années nous assistons aussi à l'entrée de ce nouveau matériau dans le domaine photovoltaïque. C'est dans ce cadre que nous proposons de développer ce chapitre.

Dans ce chapitre nous allons décrire brièvement les semiconducteurs composés IV-IV en mettant l'accent particulièrement sur le matériau SiGe. Nous présenterons l'ensemble de ses principales propriétés physiques qui seront utilisées au cours de notre étude.

2.2 Les semiconducteurs IV-IV

Les semiconducteurs, en général, sont des matériaux dont la conductivité électrique ($\sigma = 10^{-6}$ à $10^2 \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$) est intermédiaire entre celle des conducteurs ($\sigma = 10^2$ à $10^6 \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$) et celle des isolants ($\sigma = 10^{-16}$ à $10^{-8} \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$). On peut classifier les matériaux en conducteurs, semi-conducteurs et isolants par rapport à la largeur de leur bande interdite. Les propriétés des semiconducteurs, dépendent fortement de leur pureté, de l'orientation et des irrégularités de leur structure, de la température et d'autres entités physiques et chimiques. Ces propriétés représentent leur avantage principal, puisqu'elles à l'origine de la fabrication de la plupart des composants électroniques et optoélectroniques ayant des caractéristiques très diversifiées.

Il y a plusieurs familles de composés semiconducteurs, dont trois d'entre elles sont les plus étudiées et les plus utilisées, à savoir les familles de semiconducteurs II-VI (CdTe, ZnS, CdSe,...), III-V (GaAs, InP, InSb,...) et IV-IV (SiGe, SiC,...).

Les semiconducteurs IV-IV sont des corps composés d'éléments de la colonne IV du tableau périodique de Mendeleïev. Cette colonne comprend les éléments C, Si, Ge, Sn et Pb. Tous ces éléments n'ont pas le même intérêt dans l'industrie de la microélectronique: sont principalement utilisés le silicium et le germanium pour leurs propriétés semiconductrices lorsqu'ils se trouvent à l'état pur et monocristallin. Nous nous focaliserons dans la suite sur ces matériaux Si et Ge.

Le silicium facilite grandement la fabrication des circuits intégrés car son oxyde SiO_2 est très stable et bon isolant. De plus, l'abondance sur terre du silicium permet de fabriquer des cristaux et donc des substrats peu coûteux. Par contre, certaines propriétés du silicium sont relativement moins bonnes que celles d'autres matériaux semiconducteurs comme les III-V, principalement en ce qui concerne la mobilité des porteurs. Cependant, les alliages semiconducteurs (Si-X) permettent de passer outre ces limitations du silicium et ainsi de répondre aux exigences des futurs nœuds technologiques. Parmi les matériaux à l'étude, le meilleur candidat est obtenu simplement en alliant le silicium au germanium. De nombreuses études conduites ces deux dernières décennies sur cet alliage ont largement démontré son potentiel.

2.3 Le matériau Silicium-Germanium SiGe

Le SiGe est un composé binaire, appartenant au groupe IV-IV, avec un gap indirect. Ce semiconducteur est connu pour ses propriétés très importantes, on s'intéressera pour notre part, spécialement aux propriétés de luminescence, qui ne peuvent être comprises que dans un contexte global d'une compréhension de propriétés telles que: la structure cristalline du SiGe, ses caractéristiques électriques, optiques et thermiques

2.4 Caractéristiques structurelles

2.4.1 Obtention de cristaux massifs de Si et de Ge

Les cristaux massifs de silicium et de germanium sont majoritairement obtenus par la méthode développée par Czochralski. Le cristal est obtenu à partir d'une solution du matériau la plus pure possible et se trouvant légèrement au-dessus de la température de fusion. Un germe monocristallin du matériau à cristalliser va être amené au contact de cette solution. Lors du refroidissement et de la solidification au niveau du germe, les atomes vont s'assembler de manière à respecter l'arrangement imposé par ce dernier. Le cristal va ensuite croître par rotation et tirage. Cette méthode permet d'obtenir des cristaux de grande taille (> 30 cm de diamètre et de plus d'un mètre de hauteur pour le silicium) et de grande qualité cristallographique [3].

2.4.2 Structure cristalline

Le silicium et le germanium sont deux éléments de la colonne IV du tableau de Mendeleïev. Dans cette colonne, les atomes possèdent quatre électrons de valence et peuvent donc former jusqu'à quatre liaisons covalentes. Les trois premières lignes des colonnes III, IV et V du tableau de Mendeleïev sont rappelées dans le Tableau 2.1.

Tableau 2.1 : Trois premières lignes des colonnes III, IV, et V de tableau de Mendeleïev.

III	IV	V
⁵ B 10.811	⁶ C 12.011	⁷ N 14.0067
¹³ Al 26.9815	¹⁴ Si 28.068	¹⁵ P 30.9738
³¹ Ga 69.72	³² Ge 72.59	³³ As 74.9216

Les atomes situés dans les colonnes III seront des dopants de type p pour le silicium et le germanium monocristallin, alors que ceux situés dans la colonne V seront des dopants de type n. Le silicium et le germanium sont totalement miscibles. Ils peuvent former des alliages Si_{1-x}Ge_x (ou en abrégé SiGe) d'une grande gamme de compositions. Comme le silicium, le germanium possède une structure cristalline de type diamant (figure 2.1) et la similitude de structure et des propriétés chimiques de ces deux matériaux permet la formation d'un alliage binaire Si_{1-x}Ge_x [3].

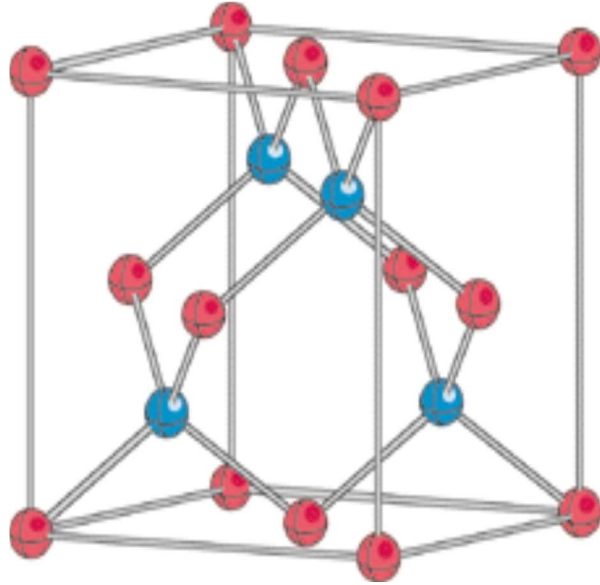


Figure 2.1 : Structure cristallin de type diamant (Si, Ge, C, ...).

Dans la structure cristalline du SiGe, les atomes de silicium et de germanium sont répartis aléatoirement et de manière homogène en respectant la composition de l'alliage. En d'autres termes, il s'agit de la structure du silicium dans laquelle certains atomes de Si ont été échangés avec des atomes de Ge, ou inversement.

Une des difficultés intervenant lors de la croissance des couches SiGe est due au désaccord de maille entre le silicium et le germanium. En effet, l'atome de germanium possède un rayon atomique (rayon de Van der Waals) légèrement plus grand que celui de l'atome de silicium. Le paramètre de maille du germanium massif est donc plus élevé que celui du cristal de silicium massif (Tableau 2.2).

Tableau 2.2 : Paramètres des atomes des cristaux de silicium et de germanium massifs.

	Si	Ge
Rayon atomique (nm)	0.132	0.137
Paramètre de maille (nm)	0.5431	0.5658
Structure cristalline	Diamant (CFC)	Diamant (CFC)

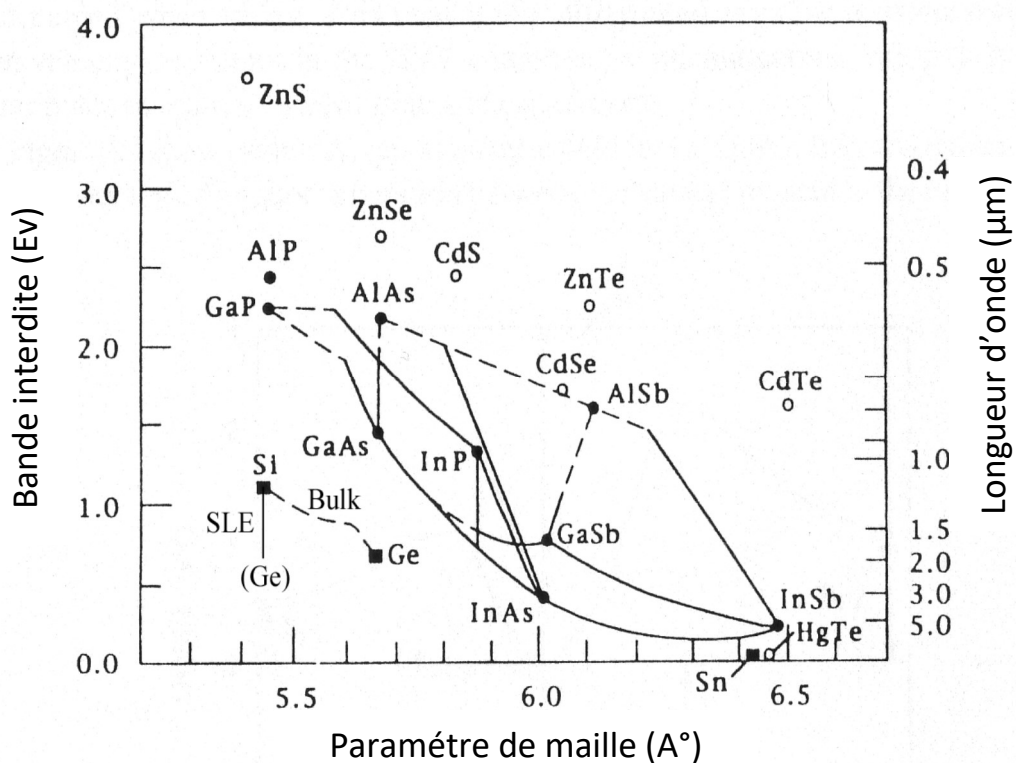


Figure 2.2 : Largeur de bande interdite et longueur d'onde optique maximale d'absorption en fonction du paramètre de maille pour différents composés et alliages semiconducteurs d'après [4]. La bande interdite du SiGe contraint est annotée par la mention (SLE).

Au regard de la figure 2.2, on peut constater que certains matériaux comme GaP, AlP et ZnS présentent un paramètre de maille équivalent à celui du Silicium ($a=0.5431$ nm). Mais toutefois, leurs réseaux cristallins sont différents de celui du diamant et par conséquent ne peuvent être utilisés pour des hétérostructures avec le Silicium.

Le Germanium ($a = 0.5658$ nm) possède une différence de longueur de maille de 4, 2%, mais un réseau cristallin compatible avec le Silicium du fait qu'il est un élément de la colonne IV du tableau de périodique des éléments de Mendeleïev. Il est alors possible de créer un alliage Silicium-Germanium basé sur le réseau cristallin du diamant dans lequel des atomes de Silicium seraient remplacés par des atomes de Germanium de façon aléatoire et homogène, ou inversement.

2.4.3 Paramètres de maille des alliages $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$

Le paramètre de maille de l'alliage $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ va varier proportionnellement en fonction de la fraction x de Germanium, allant d'un extrême à l'autre, soit du paramètre de maille du Silicium pour $x = 0$ à celui du Germanium pour $x = 1$. Celui-ci est illustré par la figure 2.3

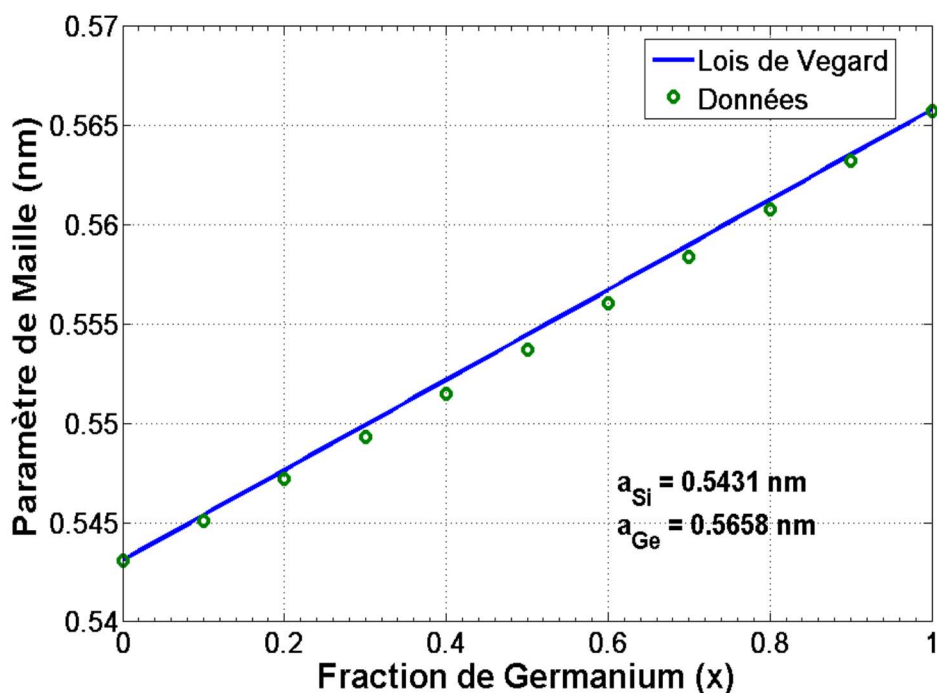


Figure 2.3 : Evolution du paramètre de maille a du $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ en fonction de la concentration x en germanium.

Les cercles sont les données mesurées, [5]

L'approximation linéaire du paramètre de maille faite par la loi de Vegard, donnée par l'équation 2.1, est représentée par le trait plein. Elle présente une infime déviation par rapport aux données mesurées (cercles). En utilisant les données expérimentales issues de Dismukes et al., une relation parabolique peut être déterminée pour évaluer avec une grande précision le paramètre des alliages $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (équation 2.2) [5].

$$a_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x} = a_{\text{Si}} \cdot (1 - x) + a_{\text{Ge}} \cdot x \quad (2.1)$$

$$a_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x} = 0.002733 \cdot x^2 + 0.01992 \cdot x + 0.5431 \quad (\text{nm}) \quad (2.2)$$

Comme on le voit sur la figure 2.3, l'écart entre la valeur du paramètre de maille interpolée par une loi de Vegard avec celle donnée par la loi parabolique est assez faible. La différence est maximum pour une concentration en germanium dans l'alliage aux alentours de 50%.

Étant donnée la différence de paramètre de maille entre le germanium et le silicium, une couche de SiGe ne pourra croître que de façon contrainte en compression sur une couche de Si. On appelle cela une croissance pseudomorphique. Du fait de cette contrainte, la couche de SiGe ne doit pas être trop épaisse : au delà d'une épaisseur critique noté h_c , la couche se relaxe, créant des dislocations, défauts, qui dégradent fortement les qualités électriques (figure 2.4).

Une croissance contrainte ou pseudomorphique présente une maille de l'alliage SiGe qui s'accommode à celle du silicium par une déformation tétragonale du réseau [6]. Le paramètre de maille parallèle de l'alliage SiGe est égal à celui du Silicium, la déformation tétragonale induit une augmentation du paramètre de maille perpendiculaire SiGe.

Une croissance relaxée ou disloquée où l'adaptation du réseau est rendue possible par la création de dislocations à l'interface SiGe/Si. Dans ce cas, l'alliage épitaxié conserve donc le paramètre de maille du matériau massif et les dislocations adaptent le désaccord de maille [7].

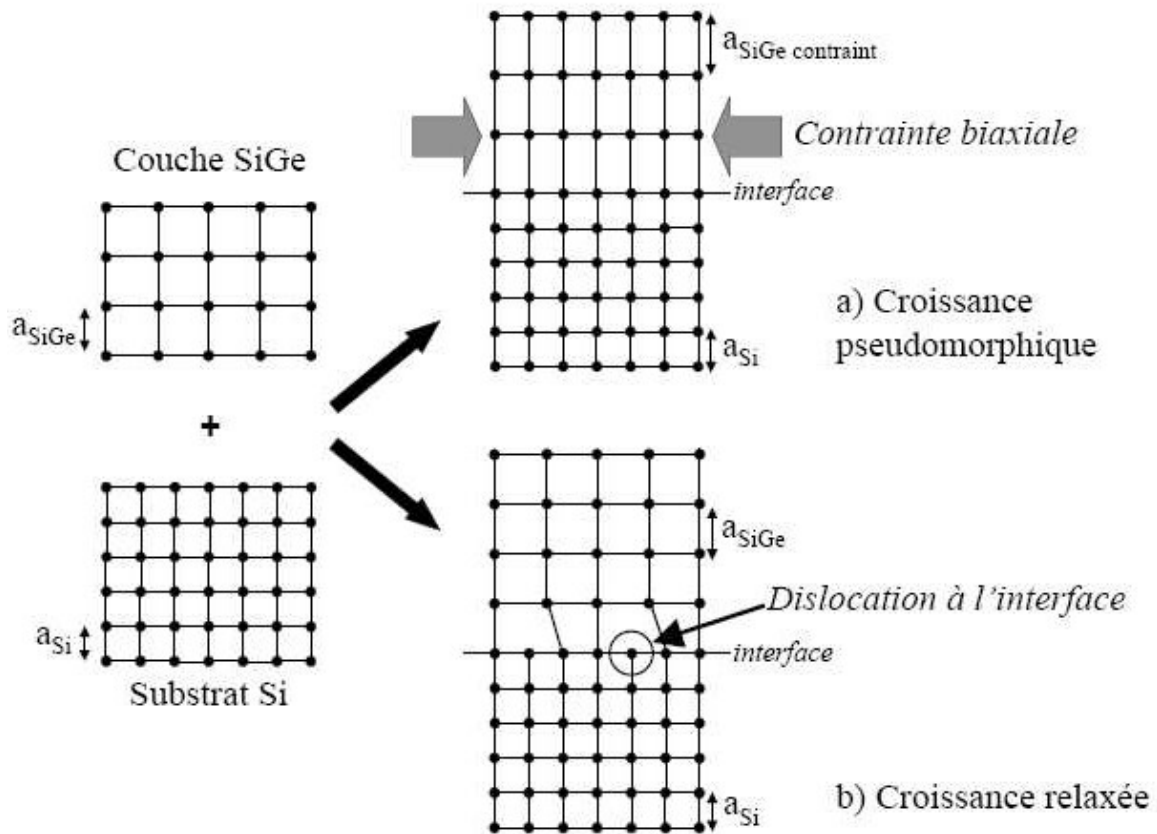


Figure 2.4: Représentation 2D des deux types de croissance possibles : (a) Croissance pseudomorphique, avec contrainte biaxiale dans le plan de l'interface ; (b) Croissance relaxée, des dislocations apparaissent dans le plan de l'interface.

Définition de l'épaisseur critique

Frank et Vander Merve [8] ont montré que si le désaccord de maille entre deux éléments est faible et si l'épaisseur du film épitaxié est peu importante, les atomes situés de part et d'autre de l'interface sont parfaitement alignés et le désaccord de maille est accommodé entièrement par la contrainte élastique du film épitaxié. En effet, on est donc dans le cas d'une croissance contrainte. En revanche, si l'épaisseur de film épitaxié dépasse la valeur critique hc (figure 2.5), la relaxation a lieu par l'introduction de dislocations de désaccord de maille. En résumé, la valeur critique hc représente l'épaisseur maximale que peut avoir le film épitaxié si l'on veut rester dans le cas d'une croissance contrainte [9].

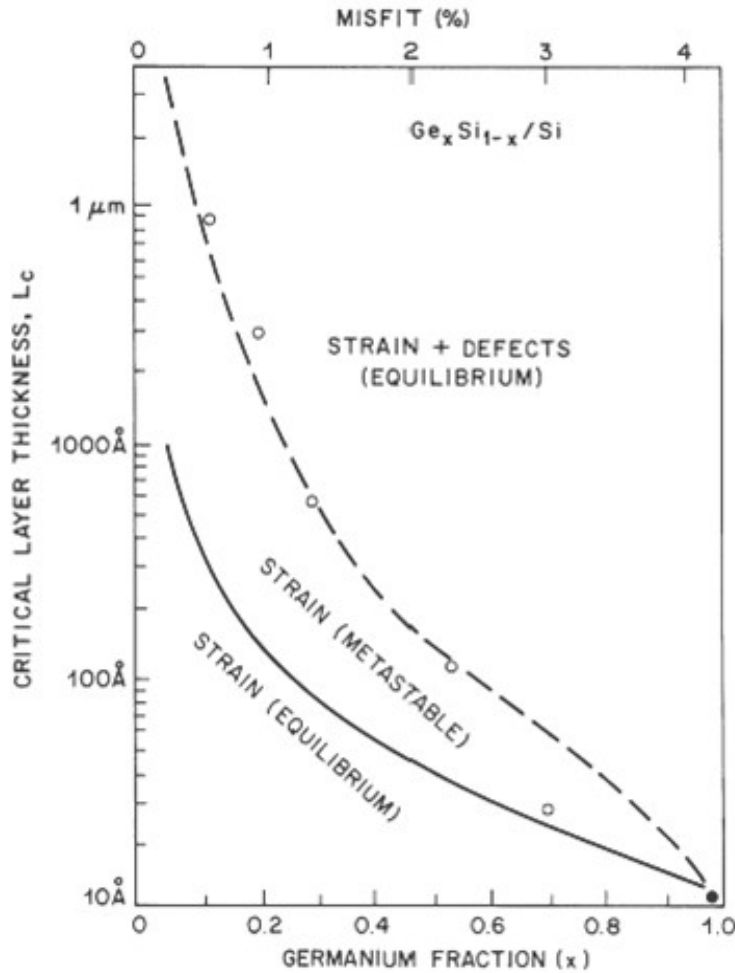


Figure 2.5 : Espace de stabilité des films SiGe déposés sur substrat Si indiquant les courbes d'épaisseurs limites en fonction de la composition pour les états stables et métastables [10]

Entre une épaisseur faible, où la couche est stable, et une grande épaisseur, où la couche est entièrement relaxée, il existe une zone dite métastable, dans laquelle la couche est intégralement contrainte, mais tout apport d'énergie supplémentaire (implantation ionique, recuit...) pourrait avoir pour conséquence l'apparition de dislocations dans la couche de SiGe.

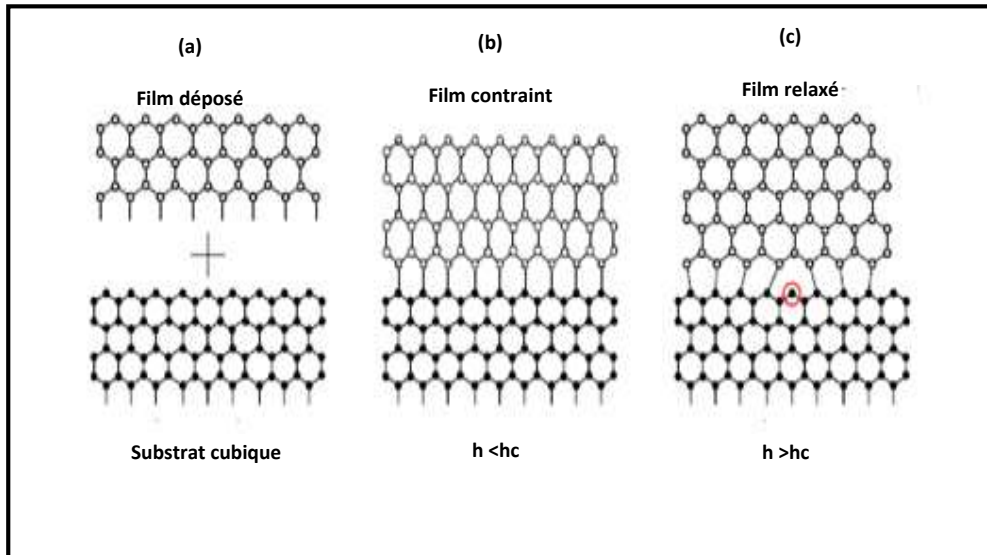


Figure 2.6: Epitaxie d'un film en désaccord de maille avec le substrat cubique. Une épaisseur h plus faible que l'épaisseur critique h_c conduit à un film contraint pseudomorphe (b) alors que dans le cas d'une épaisseur plus importante que h_c , il y a relaxation des contraintes de la couche épitaxiée par génération de dislocations à l'interface (c).

L'épaisseur critique h_c est généralement augmentée par la présence, au dessus de la couche de SiGe déposée, d'une couche de silicium qui aura donc le même paramètre de maille que le substrat. Le SiGe pris en « sandwich » entre deux couches de Si est stabilisé et risque ainsi moins de relaxer.

La figure 2.5 fait apparaître deux courbes. La courbe inférieure définit la limite de stabilité thermodynamique. L'épaisseur limite pour obtenir un film SiGe thermodynamiquement stable pour 40% de Germanium, est de 5 à 6nm. Néanmoins, au-delà de cette valeur, le film SiGe peut être dans un état dit métastable. Pour 40% de Germanium, le film de SiGe restera métastable jusqu'à une épaisseur de 25nm environ.

2.5 Propriétés électriques

Les propriétés électriques d'un matériau proviennent de son gap d'énergie interdite E_g et de sa densité de porteurs. Avant de détailler ces valeurs pour le SiGe, nous allons rappeler rapidement quelques notions essentielles de physique. Le gap d'énergie interdite est défini comme étant la différence d'énergie entre le haut de la bande de valence et le bas de la bande de conduction. Le diagramme d'énergie d'un matériau est présenté dans la figure 2.7.

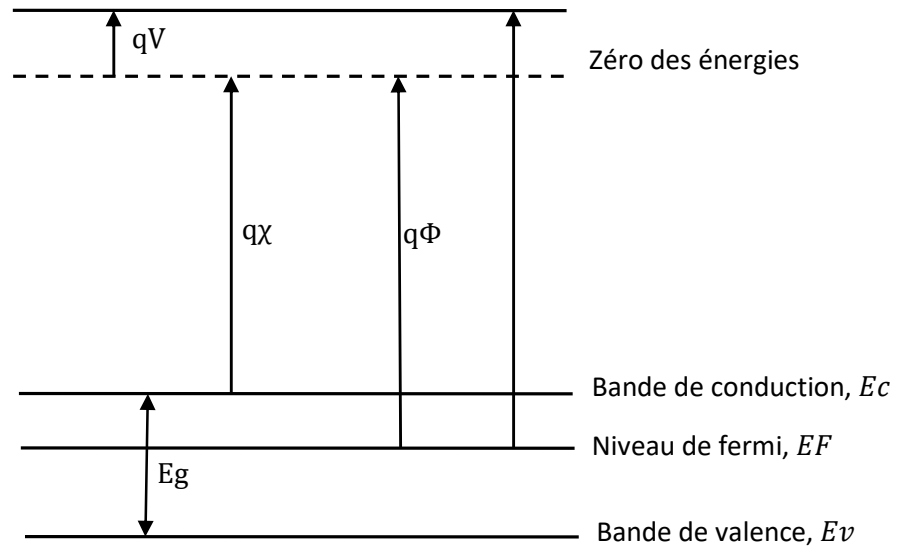


Figure 2.7: Diagramme des énergies pour un matériau q est la charge élémentaire, V le potentiel électrostatique pouvant régner dans le matériau, χ l'affinité électronique, ϕ le travail de sortie, et ϕ le potentiel d'ionisation.

Le bas de la bande de conduction varie spatialement avec le potentiel électrostatique macroscopique, V , régnant à l'intérieur du matériau. L'affinité électronique, χ , peut être définie comme la quantité d'énergie dégagée suite à la capture d'un électron par un atome en phase gazeuse [11]. Plus l'affinité électronique est grande plus la capture d'un électron par l'atome dégage de l'énergie et plus cette capture est stable. Le travail de sortie, ϕ , correspond au travail à fournir pour extraire une particule du système sans l'emmener à l'infini, mais en la laissant à proximité immédiate du système où elle reste soumise au même potentiel électrostatique, V . Enfin, le potentiel d'ionisation, ϕ , est l'énergie nécessaire pour extraire une particule du système et la mettre à l'infini.

Le niveau de Fermi, E_F , correspond au plus haut niveau énergétique occupé par un électron à 0 K. La probabilité d'occupation d'un niveau énergétique E par un électron obéit à la statistique de Fermi-Dirac, défini par l'Eq. 2.3. La probabilité d'occupation de l'énergie E par un trou est $1 - f(E)$.

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} \quad (2.3)$$

Avec :

E_F : le niveau de Fermi [eV]

k : la constante de Boltzmann [$8,617 \times 10^{-5} \text{eV.K}^{-1}$]

T : la température [K].

Il est également possible de représenter le diagramme de bande d'un semiconducteur dans l'espace réciproque qui est l'espace des vecteurs d'onde, k , comme le montre la Figure 2.8.

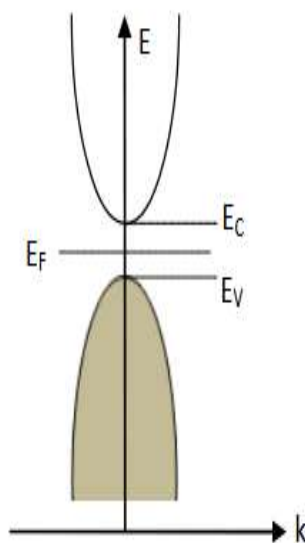


Figure 2.8: Schéma du diagramme de bande dans l'espace réciproque à 0 K. La bande de valence est remplie par les électrons et aucun électron ne se trouve dans la bande de conduction

Les bandes de valence et de conduction sont composées de niveaux énergétiques continus, on parle aussi d'états. Le nombre de ces niveaux n'est cependant pas constant à cause des différents niveaux électroniques des atomes. On parle alors de densité d'état. Ces dernières dépendent des caractéristiques du matériau et de la température. Pour le Si, la densité d'état aux bords des bandes de conduction et de valence, N_c et N_v respectivement, est donnée par :

$$N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_e k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \approx 4.82 \cdot 10^{15} \left(\frac{m_e}{m_0} \right)^{3/2} \cdot T^{3/2} \approx 5.26 \cdot 10^{15} T^{3/2} \quad (2.4)$$

$$N_v = 2 \left(\frac{2\pi m_h k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \approx 2.18 \cdot 10^{15} \cdot T^{3/2} \quad (2.5)$$

La densité d'état des bandes de conduction et de valence pour Ge est décrite par :

$$N_c = 4.82 \cdot 10^{15} \left(\frac{m_e}{m_0}\right)^{3/2} \cdot T^{3/2} \approx 1.96 \cdot 10^{15} \cdot T^{3/2} \quad (2.6)$$

$$N_v \approx 1.04 \cdot 10^{15} \cdot T^{3/2} \quad (2.7)$$

m_e : la masse effective des électrons dans la bande de conduction ($m_e = 1.06 m_0$ pour le Si et $= 0.55m_0$ pour le Ge) [MeV.c⁻²].

m_h : la masse effective des électrons dans la bande de valence ($m_h = 0.59 m_0$ pour le Si et $= 0.36m_0$ pour le Ge) [MeV.c⁻²].

m_0 : la masse d'un électron [9.109.10⁻³¹ kg ou 0.5101 MeV.c⁻²]

h : est la constante de Plack [4.136.10⁻¹⁵ eV.s]

2.5.1 Structure de bande du SiGe

D'une manière générale, le SiGe présente un intermédiaire entre le Silicium et le Germanium. L'augmentation progressive de la teneur en Germanium dans SiGe entraîne une modification des propriétés du cristal. Le SiGe comme le Silicium et le Germanium sont des matériaux à gap indirecte. La figure 2.9 présente les structures de bande des matériaux massifs de Silicium et du Germanium. Le minimum de la bande de conduction du Germanium se situe dans la direction L de l'espace réciproque alors que pour le silicium, le minimum de la bande de conduction est la vallée Δ . Pour les alliages SiGe, la largeur de bande interdite dépend à la fois de la teneur en Ge et de son état de contrainte.

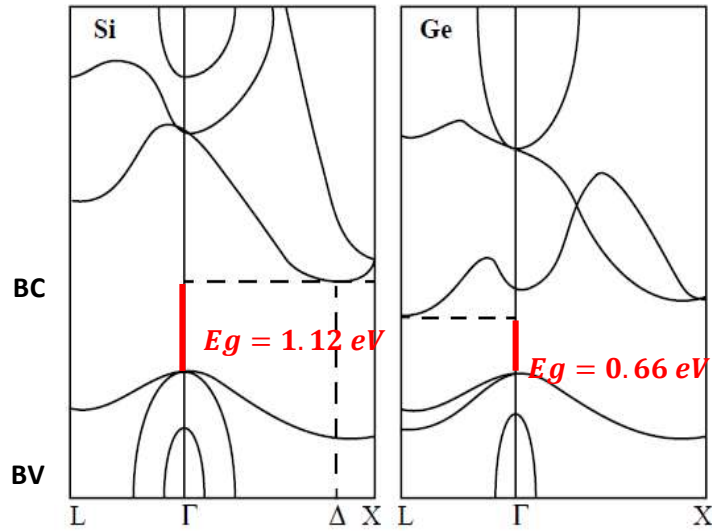


Figure 2.9: Structure de bandes de Si et Ge

Dans un alliage SiGe l'augmentation progressive de la fraction de Ge entraîne une modification continue des propriétés du cristal de Si vers celles du Ge. L'alliage $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ aura donc un gap compris entre les gaps du Si et du Ge, qui dépend en partie des propriétés cristallines de l'alliage, mais également de son état de contrainte figure 2.10.

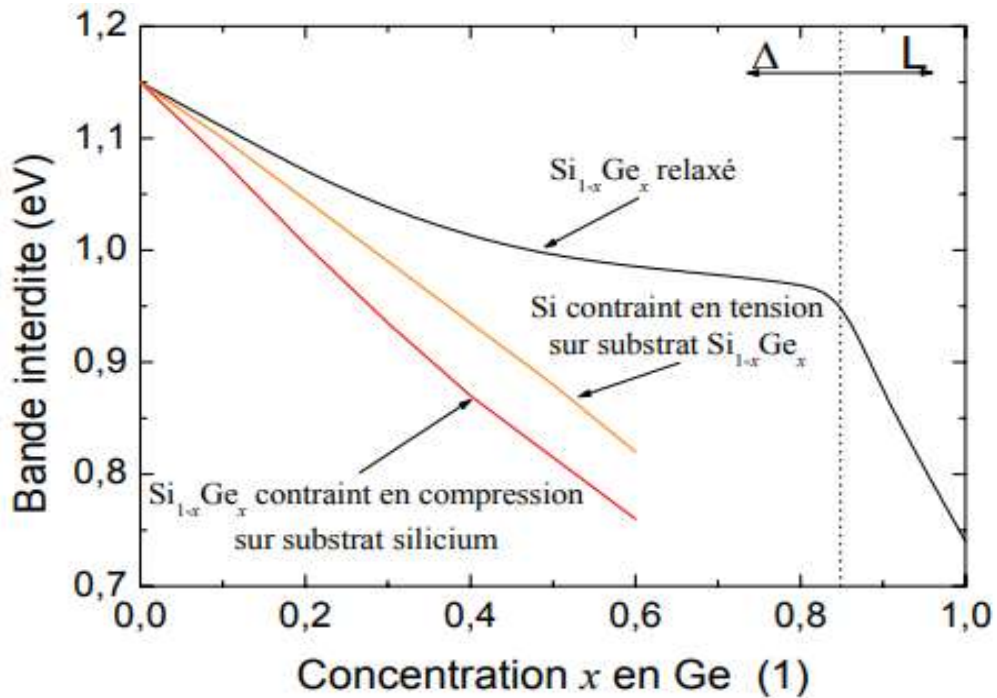


Figure 2.10: Energie de bande interdite d'un alliage $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ contraint et non contraint en fonction de la composition de Germanium [12].

La largeur de la bande interdite varie continûment du Si au Ge en fonction de la composition de germanium. La contrainte du film SiGe a également un effet important sur l'énergie de bande interdite. On remarque que la largeur de bande interdite de l'alliage SiGe est plus petite que celle du silicium pur. A température ambiante (300K), l'énergie de la bande interdite (E_g) varie entre 1,12 eV pour du silicium pur, et 0,66 eV pour du germanium pur. De plus, pour une même teneur en germanium, la largeur de la bande interdite est bien plus faible pour une couche contrainte que pour une couche non contrainte. En effet, lors de la croissance de couches SiGe contraintes sur silicium, la symétrie cubique du réseau cristallin est perdue et les dégénérescences de la bande de conduction et de la bande de valence sont partiellement levées, ce qui conduit à une diminution de l'énergie de la bande interdite par rapport à celle de l'alliage SiGe non contraint.

On trouve dans la littérature des différentes expressions permettant le calcul de la largeur de la bande interdite de l'alliage SiGe contraint sur Si. Ces relations sont exprimées en fonction de la teneur en Germanium et de l'énergie de bande interdite du silicium E_0 .

$$E_{gSiGe}(x_{Ge}) = E_0 - 1.02 \cdot x_{Ge} + 0.52 \cdot x_{Ge}^2 \quad [13] \quad (2.8)$$

$$E_{gSiGe}(x_{Ge}) = E_0 - 0.74 \cdot x_{Ge} \quad [14] \quad (2.9)$$

$$E_{gSiGe}(x_{Ge}) = E_0 - 0.96 \cdot x_{Ge} + 0.43 \cdot x_{Ge}^2 - 0.17 \cdot x_{Ge}^3 \quad [15] \quad (2.10)$$

2.5.2 Mobilité des porteurs de charge

La mobilité dans un semiconducteur est un paramètre important pour le transport des charges. Cette mobilité μ est définie comme le rapport entre la vitesse d'une charge v et les tensions appliquées E pour la mettre en mouvement.

$$v = \mu E \quad (2.11)$$

Plus la mobilité va être élevée, plus les charges vont pouvoir être transportées rapidement. Le silicium possède des valeurs de mobilité pour les électrons et les trous relativement faibles. La mobilité des porteurs est plus élevée dans le germanium, avec un gain relativement important pour les trous ($> \times 3$) (Tableau 2.3).[3]

Tableau 2. 3 : Mobilité des électrons et des trous dans le silicium et le germanium.[3]

		Si	Ge
Mobilité ($\text{cm}^2 \text{v}^{-1} \text{s}^{-1}$)	Electrons	1450	3900
	Trous	505	1800

La mobilité des électrons et des trous dans l'alliage $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ est donnée par [16] :

$$\mu_n(x) = 1500 (1 - x) + 3900x \quad (2.13)$$

$$\mu_p(x) = 450 (1 - x) + 1900x \quad (2.14)$$

2.5.3 La longueur de diffusion

La longueur de diffusion des porteurs, autrement dit la durée de vie des porteurs minoritaires dans le matériau, sert à optimiser les procédés de fabrication des composants électroniques spécialement dans le domaine du photovoltaïque. Physiquement, elle est décrite comme la distance moyenne du parcours de diffusion des porteurs dans le matériau avant sa recombinaison avec un porteur majoritaire. Elle est exprimée par l'équation [17] :

$$l = \sqrt{D\tau} \quad (2.15)$$

Avec :

τ : la durée de vie des porteurs [s].

D : le coefficient de diffusion des porteurs [$\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$], défini par :

$$D = KT \frac{\mu}{q} \quad (2.16)$$

Avec :

μ : la mobilité des porteurs [$\text{cm}^2 \cdot \text{v}^{-1} \text{s}^{-1}$]

2.6 Propriétés thermique

2.6.1 Conductivité thermique

La conductivité thermique d'une couche permet d'évaluer sa capacité à transporter la chaleur, ou à l'évacuer dans le cas de son auto échauffement. La figure 2.11 montre l'évolution de la conductivité thermique de l'alliage $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ en fonction de sa concentration en germanium [18]. Cette conductivité est maximale pour le silicium. Elle atteint sa valeur minimale pour l'alliage $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ quelle que soit la proportion de germanium, puis augmente à nouveau pour le germanium, sans toutefois atteindre la valeur obtenue dans le silicium. La conductivité thermique est environ treize fois plus faible dans le $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ que dans le silicium, et environ deux fois plus faible dans le germanium que dans le silicium.

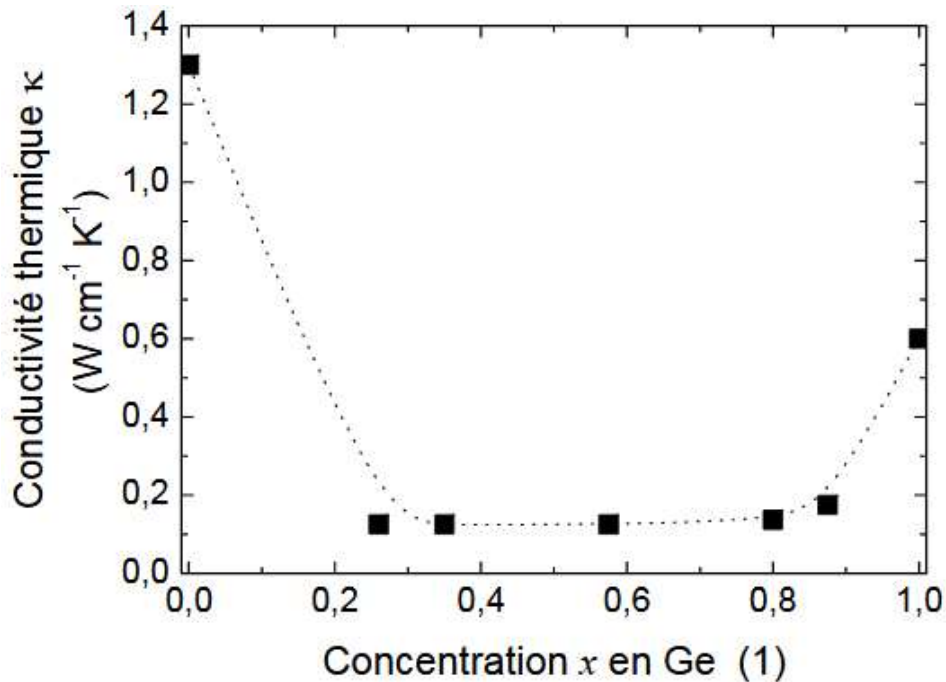


Figure 2.11: Conductivité thermique du $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ en fonction de la concentration en germanium [18]

Une des hypothèses pour expliquer la forme en U de la courbe est que dans un alliage, les phonons vont subir un nombre de collisions plus important, car les sites du réseau peuvent être occupés aléatoirement par des atomes de silicium ou de germanium. Le libre parcours moyen de ces derniers sera donc plus faible, induisant donc un transport moins efficace de la chaleur

2.6.2 Température de fusion des alliages $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$

On peut à partir d'atomes de silicium et de germanium former l'alliage $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$. La figure 2.12 montre le diagramme de phase de cet alliage (d'après [18]).

Comme on peut le voir, il n'existe qu'une seule phase solide et qu'une seule phase liquide quelle que soit la concentration en germanium x de l'alliage: le silicium et le germanium sont donc miscibles en toutes proportions. La température de fusion du silicium est de 1414°C , celle du germanium est de 938°C . La température de fusion de l'alliage se situe entre ces deux valeurs extrêmes [3], elle peut être évaluée à partir d'une interpolation parabolique de la courbe solide (équation 2.17) [4].

$$T_s \approx 1412 - 738.x + 263.x^2(^\circ\text{C}) \quad (2.17)$$

Nous pouvons constater que pour des alliages SiGe à forte teneur en Germanium (i.e. > 60 at.%), les traitements thermiques à très haute température ($>1000^\circ\text{C}$) ne pourront être réalisés en raison d'un possible changement de phase.

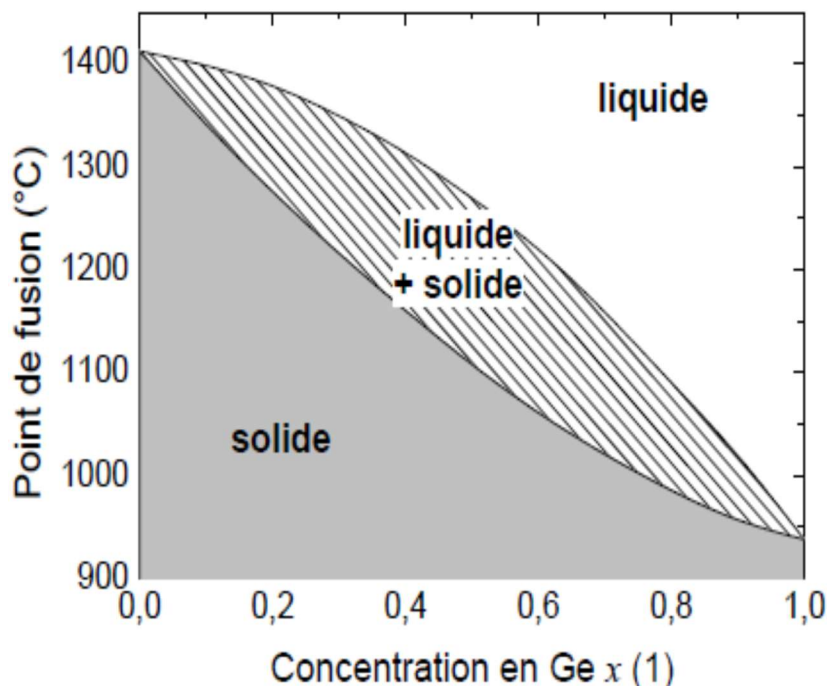


Figure 2.12 : Evolution de la température de fusion des alliages $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ en fonction de la teneur en Germanium [4].

2.7 Propriété optique

Lorsqu' on parle de propriétés optiques pour n'importe quel matériau, on fait référence à son indice de réfraction ainsi que son coefficient d'absorption optique.

2.7.1 Indice de réfraction

La lumière se propage selon l'indice de réfraction le plus fort. Cette propriété est fondamentale pour gérer la propagation de la lumière dans un composant qui se constitue de plusieurs matériaux.

L'indice de réfraction est aussi un facteur de grande influence pour les applications photovoltaïques, car il nous permet d'augmenter l'efficacité d'absorption d'une cellule solaire et d'obtenir un meilleur rendement par conséquent. Ce dernier est défini par le rapport:

$$n = c/v \quad (2.18)$$

Avec:

c : la vitesse de la lumière dans le vide.

v : la vitesse de la lumière dans le matériau.

L'indice de réfraction de Si et Ge est estimé approximativement à 3.42 et 4 respectivement [19, 20].

La vitesse de la lumière dans le matériau dépend généralement de la longueur d'onde .Un exemple de Si, réalisé par Aspens et Studna pour des longueurs d'onde allant de 0.21 μm à 0.83 μm , est illustré dans la figure 2.13 [21].

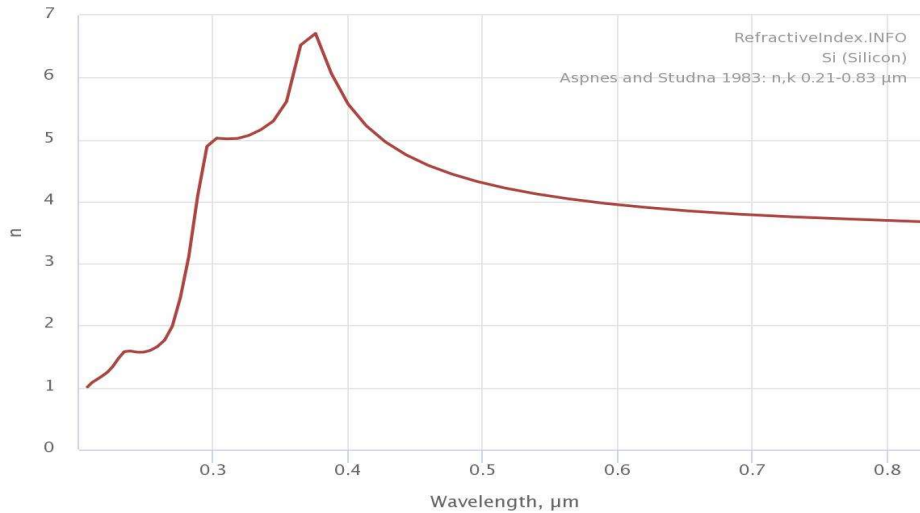


Figure 2.13 : Indice de réfraction du Si [21].

On peut voir clairement que l'indice de réfraction est inversement proportionnel à la longueur d'onde.

Les chercheurs ont aussi démontré une relation entre l'indice de réfraction et l'énergie d'un photon absorbé par le matériau sous l'expression [22]:

$$E_g = \frac{hc}{\lambda} \quad (2.19)$$

En se basant sur cette relation, les chercheurs ont conclu que l'indice de réfraction se caractérise lui aussi par un paramètre de courbure comme le gap d'énergie interdite [22].

L'indice de réfraction intervient également dans la détermination des coefficients de réflexion et de transmission à travers la relation de Snell-Descartes :

$$n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2 \quad (2.20)$$

Avec :

n_1 et n_2 les indices de réfractons de deux milieux.

θ_1 et θ_2 les angles des rayons lumineux par rapport à la normale.

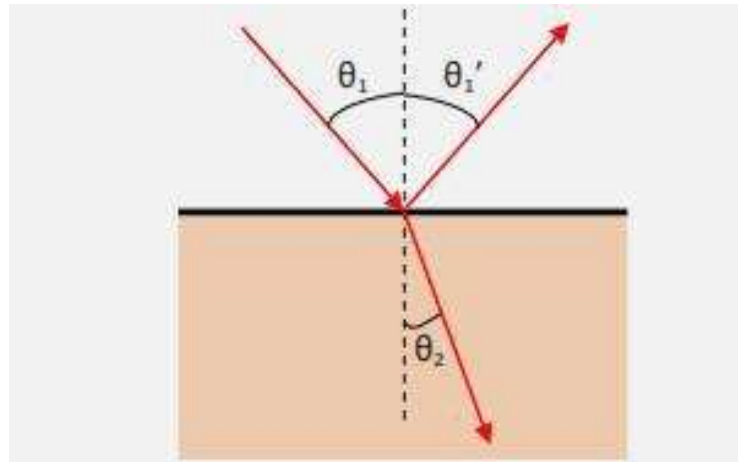


Figure 2 .14: Schéma des chemins optiques au niveau d'un dioptre plan

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 :

$$R = \frac{I_r}{I_i}, T = \frac{I_t}{I_i} \quad (2.21)$$

On a alors :

$$R = \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2}, T = \frac{2n_1}{n_1 + n_2} \quad (2.22)$$

La permittivité relative d'un matériau, aussi appelée constante diélectrique, décrit la réponse d'un matériau à un champ électrique appliqué et est définie par :

$$\epsilon_r = \chi \epsilon_0 \quad (2.23)$$

Avec :

χ la susceptibilité du matériau.

ϵ_0 la permittivité du vide [$8,85 \times 10^{-12}$ F.m⁻¹]

Elle est reliée à l'indice de réfraction par la relation :

$$n = \sqrt{\epsilon_r} \quad (2.24)$$

2.7.2 Gap d'absorption

Le coefficient d'absorption a aussi une grande importance spécialement pour les cellules solaires, car ce dernier est responsable de la quantité de photons absorbés et par conséquent la quantité de porteurs produits. En d'autre terme, c'est la quantité de lumière absorbée [23].

L'absorption dans une couche semi-conductrice est exprimée par le terme suivant :

$$I_t(\lambda) = I_i(\lambda). \exp\alpha(\lambda)d \quad (2.25)$$

$$\alpha(\lambda) = \frac{4\pi k(\lambda)}{\lambda} \quad (2.26)$$

Où:

I_i : Intensité incidente.

I_t : Intensité transmise.

$\alpha(\lambda)$: Coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde (cm^{-1}).

Le coefficient d'absorption peut aussi être exprimé en fonction de l'énergie des photons selon l'équation [24]:

$$\alpha(E) = \alpha_0 \frac{\sqrt{E-E_g}}{E} \quad (2.27)$$

Avec :

$\alpha(E)$: Coefficient d'absorption en fonction de l'énergie des photons (eV).

α_0 : Paramètre d'ajustement ($\text{eV}^{1/2} / \text{cm}^{-1}$).

Les propriétés d'absorption de Si et Ge dépendent des énergies de bande interdite directe et indirecte qui sont reportées dans tableau 2.3 à 300K.

Tableau 2.4: Energies de bande interdite directe et indirecte du Si et du Ge à 300K, [25].

	Si	Ge
Energie de bande interdite directe (eV)	4.06	0.80
Energie de bande Interdite indirecte (eV)	1.12	0.66

Les énergies de bande interdite directe et indirecte du Ge sont très proches, ce qui conduit à des propriétés d'absorption remarquables. Il est en effet possible d'obtenir l'absorption par bande interdite indirecte lorsque l'énergie des photons incidents est supérieure à 0.66 eV, mais aussi par bande interdite directe pour une énergie de photons supérieure à 0.8 eV. L'allure du spectre d'absorption du Ge (Fig.2.15), avec un bord de bande d'absorption qui varie de manière très abrupte, autour de 0.8 eV (1.5 μm), est finalement plus proche de celui des matériaux à bande interdite directe comme GaAs que du Si. De plus, le Ge a une énergie de bande interdite inférieure à celle de Si, ce qui le rend particulièrement intéressant pour la photodétection pour les longueurs d'ondes où le Si est transparent [26, 27,28].

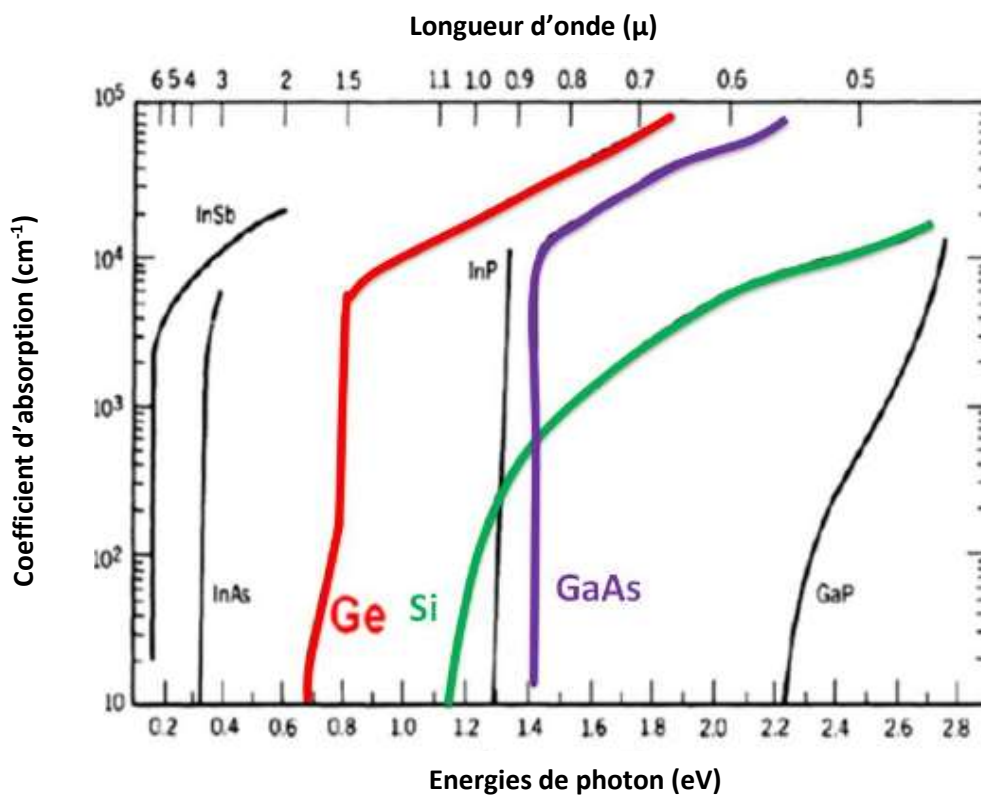


Figure 2.15: Coefficient d'absorption des différents semiconducteurs, issu de [29]

L'évolution du spectre d'absorption de l'alliage $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ a été étudiée expérimentalement en fonction de la composition de l'alliage par Braunstein et al. [30]. Les résultats de ces mesures sont représentés sur la Figure 2.16

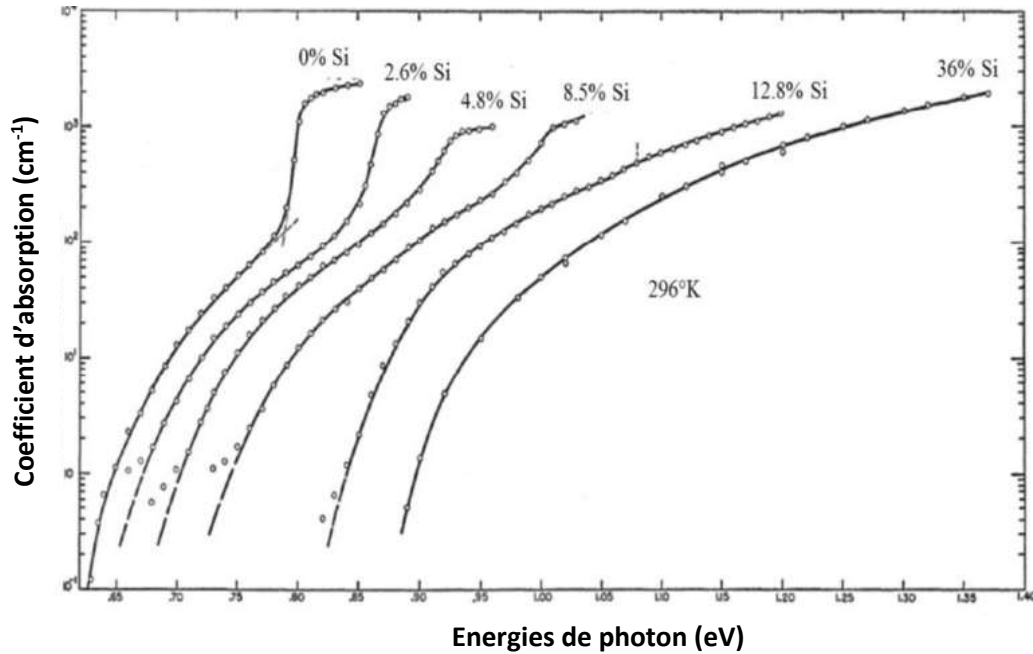


Figure 2.16: Evolution du spectre d'absorption d'un alliage $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ en fonction de l'énergie des photons incidents et du pourcentage de Si dans l'alliage (1-x) [30]

Le bord de bande d'absorption se déplace vers les hautes longueurs d'onde lorsque la concentration de Ge dans l'alliage augmente. Ce déplacement du bord de bande s'accompagne aussi d'un changement de la nature des transitions dans l'alliage. Ainsi, pour les structures "Si-like" (concentration en Ge inférieure à 85 %), la transition à bande interdite indirecte est dominante. Dans ce cas, le spectre d'absorption varie lentement en fonction de l'énergie des photons, comme par exemple dans le cas où la concentration en Si est de 36% (Fig.2.16). En revanche, lorsque la concentration de Ge est supérieure à 85% la structure devient "Ge-like", nous remarquons l'apparition progressive de bords de bande d'absorption abrupts sur le spectre d'absorption de l'alliage, indiquant que la transition à bande interdite directe est de plus en plus importante dans l'alliage. Enfin, pour le Ge pur un bord de bande très abrupt est bien visible car la transition liée à la bande interdite directe devient prépondérante [31].

2.8 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons fait une étude générale sur les composants ayant une structure IV-IV. Plus particulièrement, l'alliage $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ qui se constitue des deux composants Si et Ge. En abordant leurs principales caractéristiques et propriétés physiques tant sur le plan structurel, qu'électronique, optique et thermique pour entamer notre dernier chapitre de thèse, qui se résume à la modélisation et la simulation d'une cellule solaire à base de ce composant (SiGe).

Références bibliographiques du chapitre 2

- [1] E. Kasper, H. Kibbel, J. et al. « Growth of 100 GHz SiGe heterobipolar transistors (HBT) structures ». *Jpn. J. Appl. Phys.*, 1994, vol.33, n°4B, part 1, p. 2415-2418.
- [2] S. Gu, R.Wang, P.Han, P., et al. « Infrared absorption in SiGe/Si multiple quantum wells ». *Superlattices and Microstructures*, 1992, vol. 12, n° 4, p. 513-516.
- [3] Y. Bogumilowicz, « Epitaxie et gravure d'hétérostructures Si/Si_{1-x}Ge_x pour applications dans les technologies MOS », Thèse de doctorat, Université de Lyon (2005).
- [4] J.C. Bean, « Silicon-Based Semiconductor Heterostructures: Column IV Bandgap Engineering », in *Proceedings of the IEEE*, Vol.80, No.4, pp571-587, (Avril 1992).
- [5] E. Kasper, « Properties of Strained and Relaxed Silicon Germanium », in *EMIS Data reviews Series*, INSPEC, London, No.12, (1995).
- [6] R. Hull, J. Bean, C. John. « Thermal stability of Si/SiGe/Si heterostructures ». *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 55, No. 18, pp. 1900-1902, (1989).
- [7] R. People, J. C. Bean, « Calculation of critical layer thickness versus lattice mismatch for Si_{1-x}Ge_x strained-layer heterostructures », *Applied Physics Letters*, vol. 47 N° 3, pp. 322-324, (1985).
- [8] F. C. Frank, J. Van der Merve, « One-dimensional dislocations: I. Statistic Theory; II Misfitting monolayers and orien: overgrowths », *Proceeding. R.Soc*, vol 189, pp. 205- 216, (1949).
- [9] M. Lakhdara « Etude de Composants Semi-conducteurs Réalisés en Technologie CMOS Dédiés à la Radio Fréquence », Thèse de doctorat, Université des Frère Mentouri Constantine (2009).
- [10] J. W. Matthews, A. E. Blakeslee, « Defects in epitaxial multilayers. III. Preparation of almost perfect multilayers », *J. Cryst. Growth*, Vol. 32, pp. 265-269, (1976).
- [11] Pousse, A., Atkins, P. and Jones, L. « Chimie : molécules, matière, métamorphoses ». 3ème édition. Paris : DeBoeck Université, 1998. p. 255 à 257.
- [12] D.V.Lang, R.People, J. C. Bean et A. Sargent, « Measurement of the bandgap of Si_{1-x}Ge_x/Si strained-layer heterostructures », *Applied Physics Letter* 47(12), pp.1333–1335, Décembre 1985.
- [13] R. People, « Indirect band gap of coherently strained Ge_xSi_{1-x} bulk alloys on « 001 » silicon substrates », *Physical Review B*, Vol. 32 N° 2, pp.1405–1408, 1985.

- [14] D. V. Lang, R. People, J. C. Bean, A. M. Sergent, « Measurement of the band gap of /Si strained -layer heterostructures », Applied Physics Letters Vol. 47 N° 12, pp. 1333-1335, 1985.
- [15] J. C. Bean, « Silicon - based semiconductor heterostructures: column IV band gap engineering », Proceeding IEEE, vol. 80 N°4, pp. 571-587, 1992.
- [16] A. K. Das, « Numerical Simulation of $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ Thin film Solar Cell Using AMPS1D », IOSR Journal of Applied physics, Volum 7, Issue I ver. II (Jom. Feb. 2015), pp 23-30.
- [17] A. Mesrane, F. Rahmoune, A. Mahrane, and A. Oulebsir, « Design and Simulation of InGaN-Junction Solar Cell », International Journal of Photoenergy, vol. 2015, 2015
- [18] H. Stohr, W. Klemm Über Zweistoffsysteme mit Germanium. I. Germanium/Aluminium, Germanium/Zinn und Germanium/Silicium Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie 241, p.305 (1954).
- [19] Ioffe Physyco-Technical Institut. Si-Silicon. Electronic archive. New Semiconductor Materials. Characteristics and Properties. [Online]
<http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/Si/optic.html>.
- [20] Ioffe Physyco-Technical Institut. Ge- Germanium. Electronic archive. New Semiconductor Materials. Characteristics and Properties. [Online]
<http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/Ge/index.html>.
- [21] Optical constants of Si (Silicon). Refractive Index.Info. [Online]
<https://refractiveindex.info/?group=CRYSTALS&material=Si>.
- [22] M. Anani, H. Abid, Z. Cham a, C. Mathieu, A. Sayede, and B. Khelifa, « $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ refractive index calculations », Microelectronics Journal, vol. 38, pp. 262-266, 2007.
- [23] Y. E. Gmili, « Étude et caractérisations par cathodoluminescence de couches minces d'InGaN pour le photovoltaïque », Thèse de doctorat, Université de Lorraine (2013).
- [24] V. Gorge, « Caractérisations de matériaux et tests de composants des cellules solaires à base des nitrures des éléments III-V », Thèse de doctorat, Université Paris Sud-Paris XI (2012).
- [25] Sze, S. M. (2008).Semiconductor devices: physics and technology. John Wiley & Sons.
- [26] Vivien, L., Polzer, A., Marris-Morini, D., Osmond, J., Hartmann, J. M., Crozat, P., Cassan, E., Kopp, C., Zimmermann, H. and Fédéli, J.M., « Zero-bias 40 Gbit/s germanium waveguide photodetector on silicon » Opt. Express 20, 1096-1101.(2012).
- [27] Assefa, S., Xia, F., Bedell, S. W., Zhang, Y., Topuria, T., Rice, P.M. and Vlasov, Y. A., « CMOS-integrated high-speed MSM germanium waveguide photodetector », Opt.Express 18, 4986-4999.(2010).

- [28] Viro, L., Crozat, P., Fédéli, J. M., Hartmann, J. M., Marris-Morini, D., Cassan, E., & Vivien, L. Germanium avalanche receiver for low power interconnects. *Nature communications*, 5, 4957. (2014).
- [29] G. E. Stillman, V. M. Robbins, N. Tabatabaie, « III-V compound semiconductor devices: optical detectors », *IEEE Trans. Electron. Devices*, vol.31, no. 11, pp. 1643-1655, Nov. 1984.
- [30] Braunstein, R., Moore, A. R., & Herman, F. Intrinsic optical absorption in germanium-silicon alloys. *Physical Review*, 109(3), 695. (1958).
- [31] Vladyslav Vakarin « Composants optoélectroniques à base d'alliages SiGe riches en Ge pour le proche et moyen infrarouge », Thèse de doctorat de l'Université Paris-Saclay, Jan 2018.

CHAPITRE 3

***GENERALITES SUR LES LOGICIELS
DE SIMULATIONS***

3.1 Introduction

La simulation numérique des cellules solaires est devenue de plus en plus utilisée au cours de ces deux dernières décennies, car elle permet d'éviter la fabrication de plusieurs prototypes de cellules avec des paramètres différents et d'optimiser les paramètres physiques et géométriques en vue d'obtenir un rendement maximum. En effet, quelque soit la structure d'une cellule solaire, une optimisation de ses paramètres est nécessaire afin d'obtenir une structure conduisant au rendement maximum.

Habituellement, les paramètres à optimiser sont l'épaisseur de la cellule et la concentration de dopage, etc. [1]. Ces paramètres optimaux dépendent à leur tour de la structure de la cellule solaire, de la qualité du matériau du substrat (duré de vie, mobilité), de la qualité des contacts ohmiques, de la vitesse de recombinaison en surface (faces avant et arrière) etc...L'optimisation de la cellule solaire comprend donc l'étude de l'influence de ces paramètres sur le rendement afin d'obtenir une structure conduisant au meilleur rendement.

Plusieurs logiciels de simulation numérique ont été développés pour évaluer les performances des cellules solaires [2] parmi lesquels les programmes unidimensionnels tels que: l'AMPS-1D, SCAPS-1D, PC-1D, AFORS-HET etc. L'extension vers deux ou trois dimensions permet de simuler les fluctuations latérales dans les cellules solaires comme les joints de grains et utilise des logiciels commerciaux, tels que l'APSYS, ATLAS 2D [3].

Dans ce travail de thèse, on a opté pour le logiciel de simulation unidimensionnel AMPS-1D « Analysis of Microelectronic and Photonic Structures » qui a été développé à l'université de Pennsylvanie et le logiciel SILVACO-ATLAS

3.2 Présentation du logiciel AMPS-1D

Le logiciel de simulation AMPS-1D (Analysis Microelectronic and Photonic Structure) a été développé par le professeur Stephen Fonash et un certain nombre de ses étudiants à l'université d'état de Pennsylvanie, sous le parrainage de l'institut de recherche sur l'énergie électrique (EPRI). Ce logiciel est très populaire au sein de la communauté scientifique, on estime d'ailleurs qu'environ 800 groupes de chercheurs l'utilisent. Il a été conçu pour concevoir, analyser et optimiser les structures destinées aux applications de la microélectronique, du photovoltaïque et de l'opto-électronique [4].

L'AMPS-1D utilise une résolution numérique des équations de transport régissant le fonctionnement électrique des dispositifs à semiconducteurs qui sont:

- Equation de Poisson.
- Equation de continuité des trous.
- Equation de continuité des électrons.

3.2.1 Équation de Poisson

L'équation de poisson lie les variations du potentiel électrostatique aux densités locales de charge à travers l'équation (3.1)

$$\text{div}(\varepsilon \overrightarrow{\text{grad}} \psi) = -\rho_v \quad (3.1)$$

Où

- ψ est le potentiel électrostatique.
- ε est la permittivité locale du milieu.
- ρ_v est la densité volumique de charge.

Le champ électrique dérive du potentiel électrostatique ψ tel que :

$$\vec{E} = -\overrightarrow{\text{grad}} \psi \quad (3.2)$$

3.2.2 Équations de continuité

Les équations de continuité sont exprimées à partir des lois de conservation des porteurs libres. Elles décrivent le mode par lequel les densités d'électrons et des trous évoluent en fonction des mécanismes de transport, de génération et de recombinaison. En régime stationnaire et dans le cas d'une génération optique de paires électron-trou due à l'éclairement par la lumière. L'équation de continuité des électrons et celle des trous sont données respectivement par les expressions (3.3) et (3.4) :

$$-\frac{1}{q} \text{div}(\vec{J}_n) = G_{opt} - U \quad (3.3)$$

$$-\frac{1}{q} \text{div}(\vec{J}_p) = G_{opt} - U \quad (3.4)$$

Où

- q est la valeur absolue de la charge électrique élémentaire.

- \vec{J}_n et \vec{J}_p sont les densités de courant des électrons et des trous respectivement.
- U est le taux net de recombinaison selon le modèle Shockley-Read-Hall.
- G_{opt} est le taux de génération optique.

3.2.3 Équations de transport

Le modèle de dérive-diffusion (drift-diffusion en anglais) est le plus couramment utilisé pour décrire le transport de charge dans un semiconducteur. Ainsi, les densités de courant J_n et J_p peuvent être approximées à l'aide de la théorie de transport de Boltzmann par le modèle de dérive-diffusion [5]. En utilisant les quasi-niveaux de Fermi des électrons et des trous (E_{Fn} et E_{Fp}), leurs expressions sont données par [6]

$$\vec{J}_n = n\mu_n \overrightarrow{grad}(E_{Fn}) \quad (3.5)$$

$$\vec{J}_p = n\mu_p \overrightarrow{grad}(E_{Fp}) \quad (3.6)$$

Où

- n et p sont les concentrations des électrons et des trous respectivement
- μ_n et μ_p sont les mobilités des électrons et des trous respectivement.

On peut aussi avoir une formulation plus conventionnelle des équations de transport avec le modèle dérive-diffusion [7] :

$$\vec{J}_n = qn\mu_n \vec{E} + qD_n \overrightarrow{grad} n \quad (3.7)$$

$$\vec{J}_p = qn\mu_p \vec{E} - qD_p \overrightarrow{grad} p \quad (3.8)$$

Où

- D_n et D_p sont les coefficients d'Einstein (ou coefficient de diffusion) des électrons et des trous.

Avec la statistique de Boltzmann, ces coefficients ont pour expressions :

$$D_n = \frac{kT}{q} \mu_n \quad (3.9)$$

$$D_p = \frac{kT}{q} \mu_p \quad (3.10)$$

Le premier terme des expressions (3.7) et (3.8) représente le courant de dérive induit par le champ électrique \vec{E} . Le deuxième terme représente le courant de diffusion induit par un gradient de concentration de porteurs.

En introduisant les équations (3.5) et (3.6) dans les équations (3.3) et (3.4), on obtient :

$$\frac{1}{q} \text{div}(n\mu_n \overrightarrow{\text{grad}} E_{Fn}) = U - G_{opt} \quad (3.11)$$

$$\frac{1}{q} \text{div}(p\mu_p \overrightarrow{\text{grad}} E_{Fp}) = -U + G_{opt} \quad (3.12)$$

3.2.4 Résolution numérique du système d'équation de base

La modélisation des phénomènes de transport dans les dispositifs à semiconducteurs passe par la résolution du système à trois équations suivant :

$$\begin{aligned} \text{div}(\varepsilon \overrightarrow{\text{grad}} \psi) &= -\rho_v \\ \frac{1}{q} \text{div}(n\mu_n \overrightarrow{\text{grad}} E_{Fn}) &= U - G_{opt} \\ \frac{1}{q} \text{div}(p\mu_p \overrightarrow{\text{grad}} E_{Fp}) &= -U + G_{opt} \end{aligned} \quad (3.13)$$

Il s'agit d'un système à trois équations différentielles couplées non linéaires dont la résolution ne peut être envisagée que par une méthode de résolution numérique.

Dans l'AMPS-1D, celle-ci est basée sur la méthode des différences finies et l'algorithme de Newton-Raphson. La résolution consiste à déterminer trois variables d'état, à savoir le potentiel électrostatique ψ , les quasi-niveaux de Fermi des électrons E_{Fn} et des trous E_{Fp} , à partir desquelles les concentrations de porteurs, les champs, les courants, la densité des pièges, les taux de recombinaisons, les diagrammes de bandes et bien d'autres paramètres peuvent ensuite être calculés. Cette résolution nécessite d'imposer des conditions aux limites à la structure [8] :

- en $x = 0$ (à l'extrémité gauche de la structure) :

$$\psi(0) = \psi_0 - V_{bias} \quad (3.14)$$

$$J_n(0) - qS_{n0}[n(0) - n_0(0)] = 0 \quad (3.15)$$

$$J_p(0) + qS_{p0}[p(0) - p_0(0)] = 0 \quad (3.16)$$

- en $x=L$ (à l'extrémité droite de la structure) :

$$\psi(L) = 0 \quad (3.17)$$

$$J_n(L) + qS_{nL}[n_0(L) - n(L)] = 0 \quad (3.18)$$

$$J_p(L) - qS_{pL}[p(L) - p_0(L)] = 0 \quad (3.19)$$

Où

- ψ_0 représente le niveau du vide à l'équilibre thermodynamique en $x=0$
- V_{bias} est la tension de polarisation appliquée au dispositif
- S_n et S_p sont les vitesses de recombinaisons en surface des électrons et des trous respectivement
- n et p sont les concentrations des électrons et des trous respectivement à l'illumination
- n_0 et p_0 sont les concentrations des électrons et des trous respectivement à l'obscurité.

Afin d'élaborer les équations de poisson et de continuité, nous avons utilisé le simulateur AMPS-1D. La Figure 3.1 donne une interface de ce logiciel.

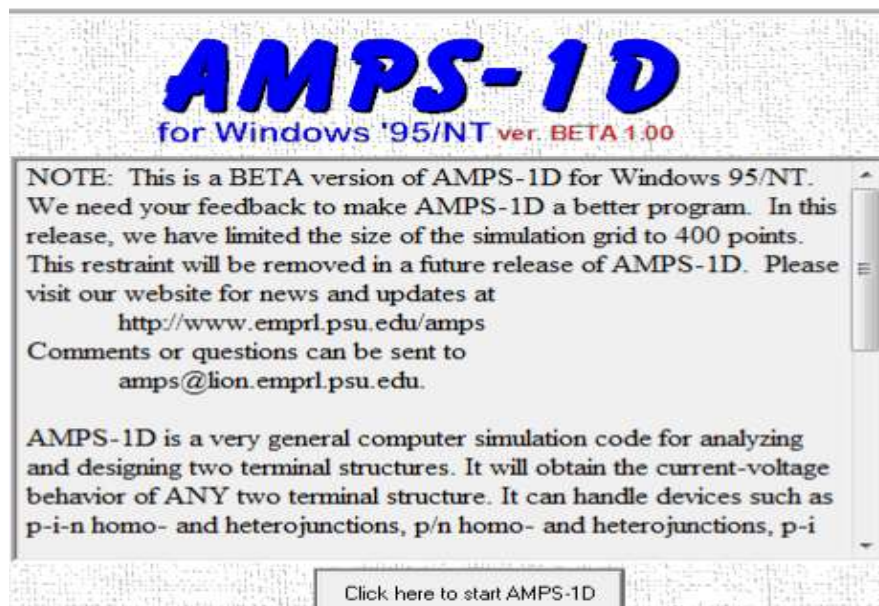


Figure 3.1 : Présentation du programme AMPS 1D [9]

3.2.5 Utilisation de l'AMPS

Le logiciel AMPS-1D se divise en quatre parties. Les trois premières sont pour la programmation où il faut introduire les paramètres du dispositif, des régions et de l'excitation. La quatrième partie concerne les résultats de la simulation où le logiciel du calcul, les bandes interdites, les caractéristiques J-V, les courant de recombinaison, la génération...

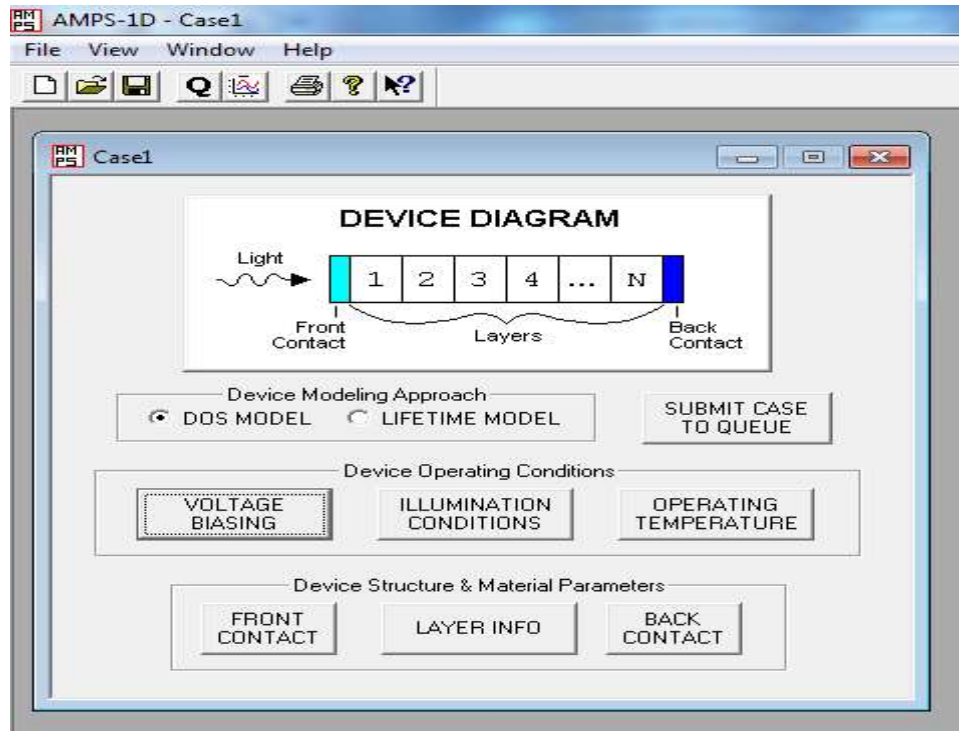


Figure 3.2 : Fenêtre principale (AMPS 1-D).

L'interface d'AMPS (Figure 3.2) est constituée de trois boîtes de dialogue. Chacune donne les paramètres nécessaires avant le lancement de la simulation par AMPS. Les trois boîtes de dialogues donnent:

- 1- Propriétés générales du dispositif et du matériau.
- 2- Conditions environnementales.
- 3- Paramètres de modélisation.

3.2.5.1. Propriétés générales du dispositif et du matériau

A- Propriétés du matériau

Dans la fenêtre informations de couche ‘‘Layer Info’’, (Figure 3.3), l'utilisateur peut spécifier les domaines suivants: L'énergie de gap (EG), la concentration de dopage de trou (NA), la concentration de dopage d'électrons (ND), la mobilité d'électrons (MUN), la mobilité des trous (MUP), l'affinité électronique (CHI), la permittivité relative (EPS), la densité d'états dans la bande de conduction (NC) et de la densité d'états dans la bande de valence (NV).

Sur le côté droit de la fenêtre, l'utilisateur peut spécifier l'épaisseur des matériaux ainsi que le nombre de points de maillage. Si plus d'un matériau doit être simulé, chaque matériau peut être caractérisé de façon indépendante. Une fois la caractérisation des matériaux est complète, la gamme de longueurs d'onde, le flux de photons et les coefficients d'absorption pour chaque longueur d'onde peuvent être assignés en cliquant sur le bouton Afficher les paramètres spectraux.

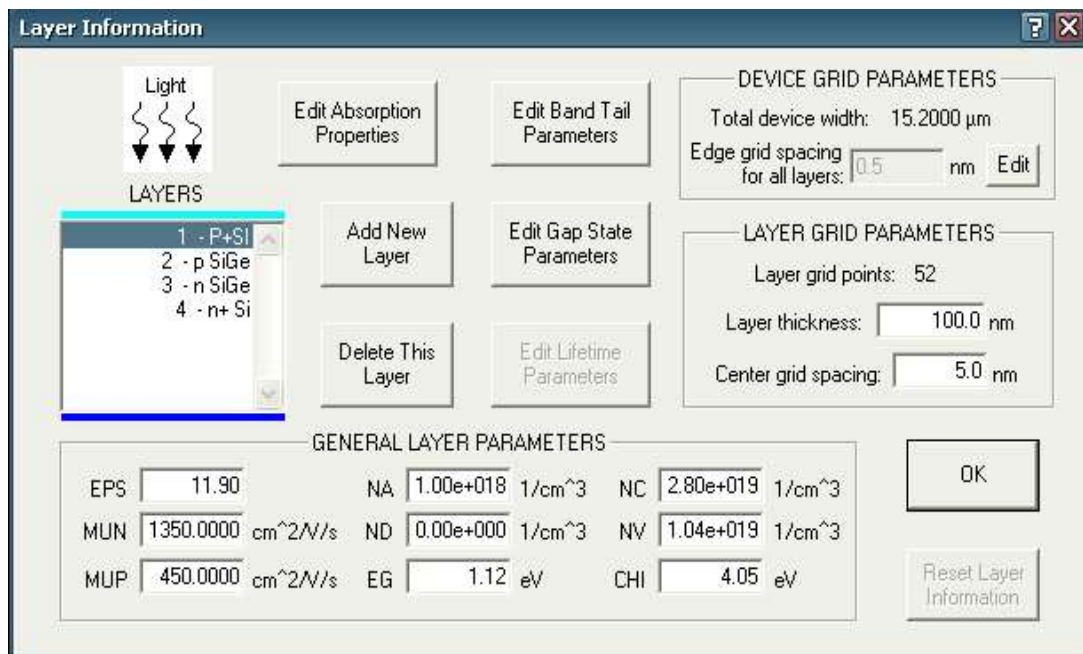


Figure 3.3 : Fenêtre d'informations des couches « layer info».

B- Propriétés générales du dispositif

Contacts avant et arrière

Les contacts avant et arrière (figure 3.4) sont définis par leur fonction de travail et par la réflectivité de l'interface du contact/semi-conducteurs. Le ϕ_{b0} et le ϕ_{bL} qui représentent la différence entre la bande de conduction (E_c) et le niveau de Fermi (E_F), respectivement à la surface avant et arrière doivent être choisis de façon à obtenir un contact ohmique à la surface avant et une négligeable barrière de Schottky à la surface arrière.

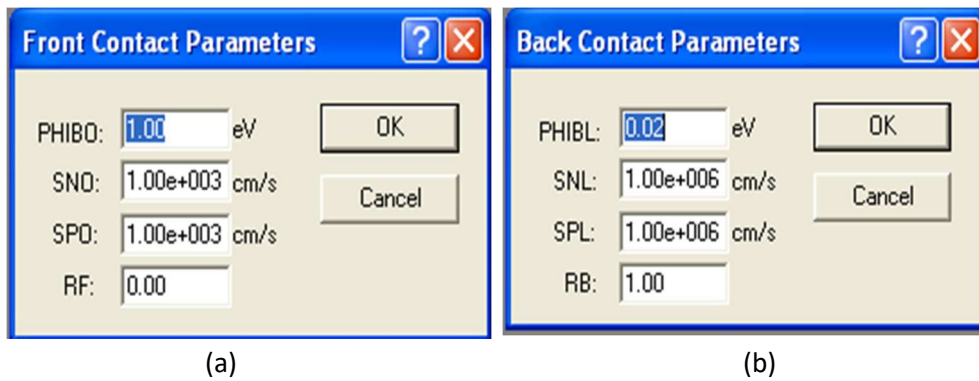


Figure 3.4: Fenêtre d'informations du dispositif: (a) Contact avant, (b) Contact arrière.

Conditions aux limites

$$PHIBO \text{ (eV)} = \phi_{b0} = E_c - E_F \quad \text{Pour : } x = 0 \text{ (surface avant)}$$

$$PHIBL \text{ (eV)} = \phi_{bL} = E_c - E_F \quad \text{Pour : } x = L \text{ (surface arrière)}$$

Vitesse de Recombinaisons aux surfaces

$$SNO \text{ (cm/s)} = S_{NO} \quad \text{Pour les électrons à l'interface } x=0$$

$$SPO \text{ (cm/s)} = S_{PO} \quad \text{Pour les trous à l'interface } x=0$$

$$SNL \text{ (cm/s)} = S_{NL} \quad \text{Pour les électrons à l'interface } x=L$$

$$SPL \text{ (cm/s)} = S_{PL} \quad \text{Pour les trous à l'interface } x=L$$

Réflectivité à la surface avant et arrière

La réflectivité de la surface avant limite le rendement quantique de la cellule et donc la densité du courant de court-circuit. Ce paramètre est réglé à 10%. La réflexion arrière a une influence négligeable sur la performance donc, on a considéré que 95% des photons atteignent la surface arrière seront réfléchis.

$RF = R_F$: Coefficient de reflexion à $x = 0$ (surface avant)

$RB = R_B$: Coefficient de reflexion à $x = L$ (surface arrière)

3.2.5.2 Conditions environnementales

L'illumination est définie discrètement sur la figure 3.5. Le nombre de photons incidents par (cm^2s) est en fonction de longueurs d'onde entre $0,38 \mu\text{m}$ et $1,24 \mu\text{m}$, avec une taille de pas de $0,02 \mu\text{m}$ et $0,03 \mu\text{m}$ [10].

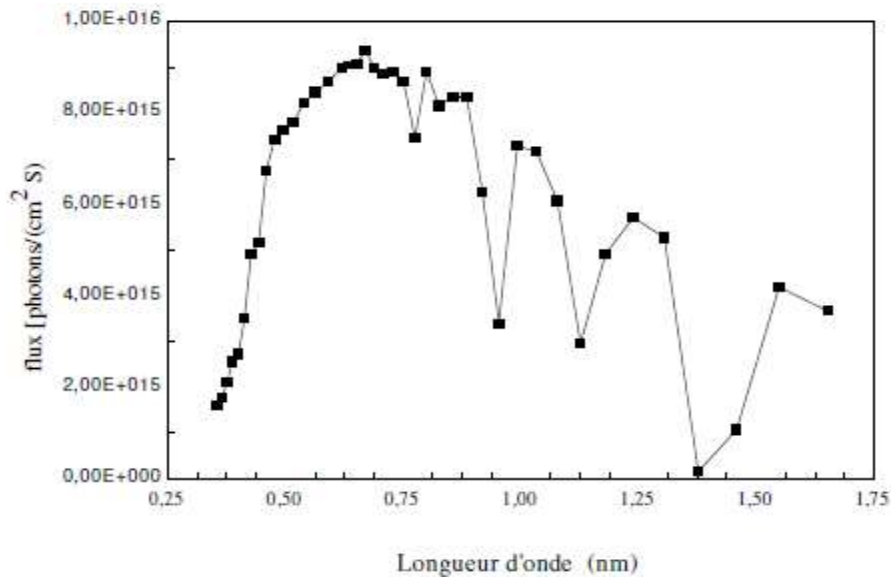


Figure 3.5: Le spectre solaire AM1.5 utilisé par l'AMPS-1D [10].

3.2.5.3 Paramètres de modélisation

Les paramètres de modélisation sont : le type de mode de fonctionnement, le maillage (grid spacing) pour les calculs numériques, la tension de polarisation pour laquelle JV et QE devraient être générés.

Le logiciel AMPS peut fonctionner en deux modes distincts: le mode de la densité d'état ou DOS (Density Of States) ou le mode de la durée de vie (Life time). Une description des deux modes peut être trouvée dans le manuel d'AMPS [9].

Le mode de la durée de vie: ce mode accepte les entrées sous forme de durée de vie des porteurs, qui sont supposés constants, indépendants de la lumière et de la tension de polarisation, et le processus de recombinaison sera modélisé par un modèle linéaire donné par la relation :

$$\text{Type p : } R_n = \frac{\Delta n}{\tau_n}$$

$$\text{Type n : } R_p = \frac{\Delta p}{\tau_p}$$

Δn (Δp) : Le changement de la population des électrons (trous) dans la bande de conduction (valence) par rapport à la concentration à l'équilibre thermique n_0 (p_0).

τ_n et τ_p : Les durées de vie des électrons et des trous, respectivement.

- Le mode DOS (Density Of Stats): ce mode permet de définir multiples états de défauts, en utilisant les densités, les distributions d'énergie, et les sections de capture. En se basant sur ces informations la recombinaison et les défauts sont calculés en utilisant le formalisme de Shockley-Read-Hall.

Dans ce travail, le mode DOS a été utilisé. Le maillage a été choisi pour être plus dense dans les couches minces où des changements plus rapides se produisent dans la structure de la bande afin d'obtenir une bonne résolution.

3.2.7 Avantages et inconvénients de l'AMPS

Les majeurs inconvénients de ce logiciel sont : l'absence du traitement d'interfaces et l'obligation de l'utilisation manuelle où toutes les informations doivent être entrées à la main (spectre solaire, coefficient d'absorption...). Cependant, il est très stable en général bien que les dispositifs complexes peuvent introduire des instabilités. Il possède également, une bonne interface utilisateur, notamment un programme de traçage flexible.

3.3 Logiciel de simulation SILVACO

SILVACO (Silicon Valley Corporation) est une société Américaine, ayant son siège à Santa Clara en Californie. Elle est un des principaux fournisseurs des chaînes professionnelles des logiciels des simulations par éléments finis et de conception assistée par ordinateur pour les technologies de l'électronique TCAD (Technology Computer Aided Design). Ces outils sont employés par les compagnies des microélectroniques dans le domaine de la recherche, du développement et de la conception des dispositifs.

Le logiciel Tcad-Silvaco est un logiciel de simulation 2D/3D basé sur la méthode des éléments finis, a été fondé en 1984 par le Dr. Ivan Pesic. Ce logiciel peut modéliser non seulement des comportements électriques, optiques et thermiques des dispositifs, mais aussi des processus technologiques des structures électroniques comme le dépôt, la gravure, et le dopage par implantation ou diffusion. [11]

3.3.1 Présentation du paquet des programmes Silvaco

Sous Silvaco l'ensemble des outils de simulation et des outils interactifs permettant la conception et l'analyse de la plupart des dispositifs semiconducteurs s'appelle VWF (Virtual Wafer Fab) [12]. Les composants de base de VWF sont :

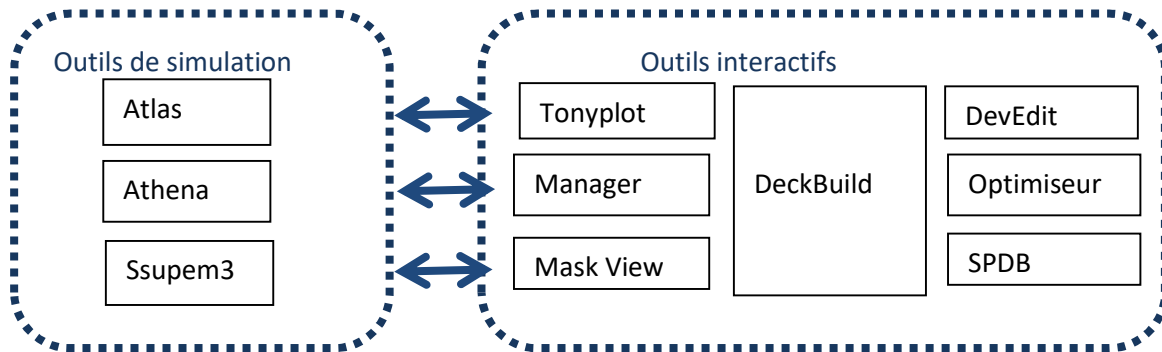


Figure 3.6 : Organigramme de la structure VWF. [13]

3.3.1.1 Outils de simulation (VWF core tools)

Ces outils simulent soit leurs processus de fabrication ou soit leurs comportements électriques. Les outils de simulation sont SSuprem3, SSuprem4, Athena et Atlas :

-**SSuprem3** : simulateur de procédé 1D avec prolongements simples de simulations des dispositifs,

-**Athena** : simulateur 2D de procédés technologiques qui permet de simuler les différentes étapes effectuées en salles blanches et ainsi d'obtenir la structure du dispositif (couches constitutives, dimensions, géométrie) avec les profils de dopage,

-**Atlas** : simulateur 2D ou 3D de dispositifs semi-conducteurs qui permet d'obtenir leurs caractéristiques électriques (statiques ou dynamiques).

3.3.1.2 Outils interactifs (VWF interactive tools)

Ces outils sont désignés pour être utilisés en mode interactif dans la construction d'un seul fichier d'entrée. En étant basé sur une interface utilisateur qui est graphique (Graphical User Interface, GUI), le travail de construction du fichier d'entrée devient plus efficaces. Les outils interactifs peuvent être utilisés soit en relation avec un ensemble de fichiers, ou comme des composants intégrés dans l'environnant « VWF automation tools ».

Les outils interactifs sont :

-**TonyPlot** : outil de visualisation et d'analyse graphique 1D, 2D et 3D des résultats de simulations (figure 3.7).



Figure 3.7 : Environnement Tonyplot (mesh 2D)

-**MaskViews** : outil de dessin des masques (layouts) (figure 3.8).

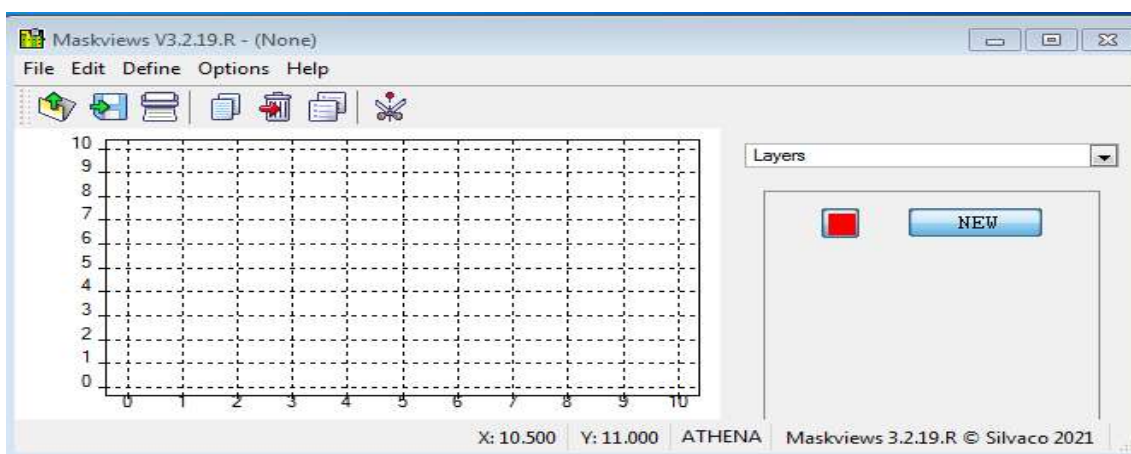


Figure 3.8 : Menu de Maskviews

-**Manager** : outil de gestion des fichiers utilisés et créés par VWF.

-**DeckBuild** : environnement d'exécution interactif qui permet la simulation des processus et de dispositifs. Il est principalement l'interface avec les outils de simulation (figure 3.9),

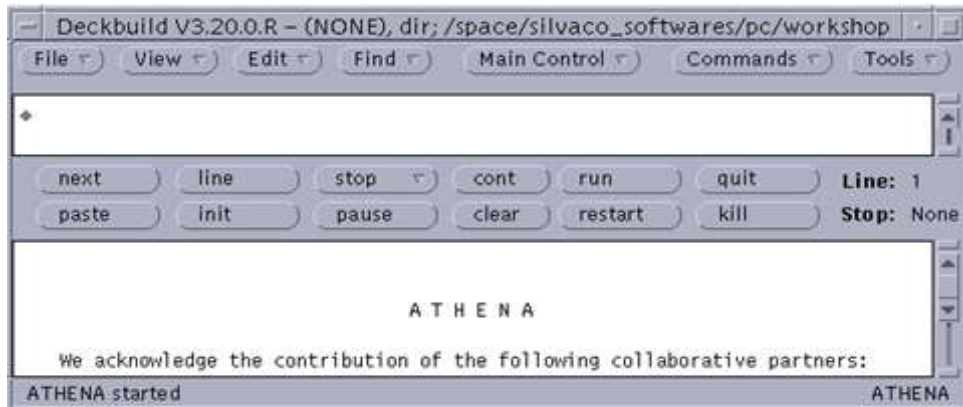


Figure.3.9 : Environnement Deckbuild

-**DevEdit** : est un éditeur de structure et outil de maillage permettant de générer ou de modifier la structure du dispositif à simuler. DevEdit peut être contrôlé par des lignes de commande ou par un écran graphique interactif.

-**Optimiseur** : outil d'optimisation automatique,

Optimiseur est un outil d'optimisation pour la calibration des simulateurs de processus et de dispositifs. Cet outil permet un ajustage automatique des paramètres électriques ou processus en jouant sur un ou plusieurs paramètres d'entrée.

-**SPDB (Semiconductor Process Data Base)** : est un produit séparé qui peut être utilisé avec DeckBuild. Il a été conçu pour stocker un grand nombre de profils de dopage mesurés expérimentalement avec les données décrivant les conditions des expériences.

3.3.2 Description d'Atlas

La capacité à simuler avec précision un dispositif semi-conducteur est cruciale pour l'industrie et milieux de recherche. L'outil de simulation ATLAS est spécialement conçu pour la modélisation 2D et 3D de composants basés sur la physique des semi conducteurs, en incluant les propriétés électriques, optiques et thermiques. Il possède une bibliothèque regroupant des matériaux prédéfinis comme il permet à l'utilisateur de définir d'autres matériaux propre à leur choix.

Il est capable de prédire les caractéristiques électriques de la plupart des composants semi-conducteurs en régime (DC), (AC), transitoire ou fréquentiel. En plus du comportement électrique "externe", il fournit des informations sur la distribution interne de variables telles que les concentrations des porteurs, les lignes de courant, le champ électrique ou le potentiel, et des données importantes pour la conception et l'optimisation des procédés technologiques. Ceci est réalisé en résolvant numériquement l'équation de Poisson et les équations de continuité des électrons et des trous en deux dimensions en un nombre fini de points formant le maillage de la structure définie par l'utilisateur ou par le programme [14].

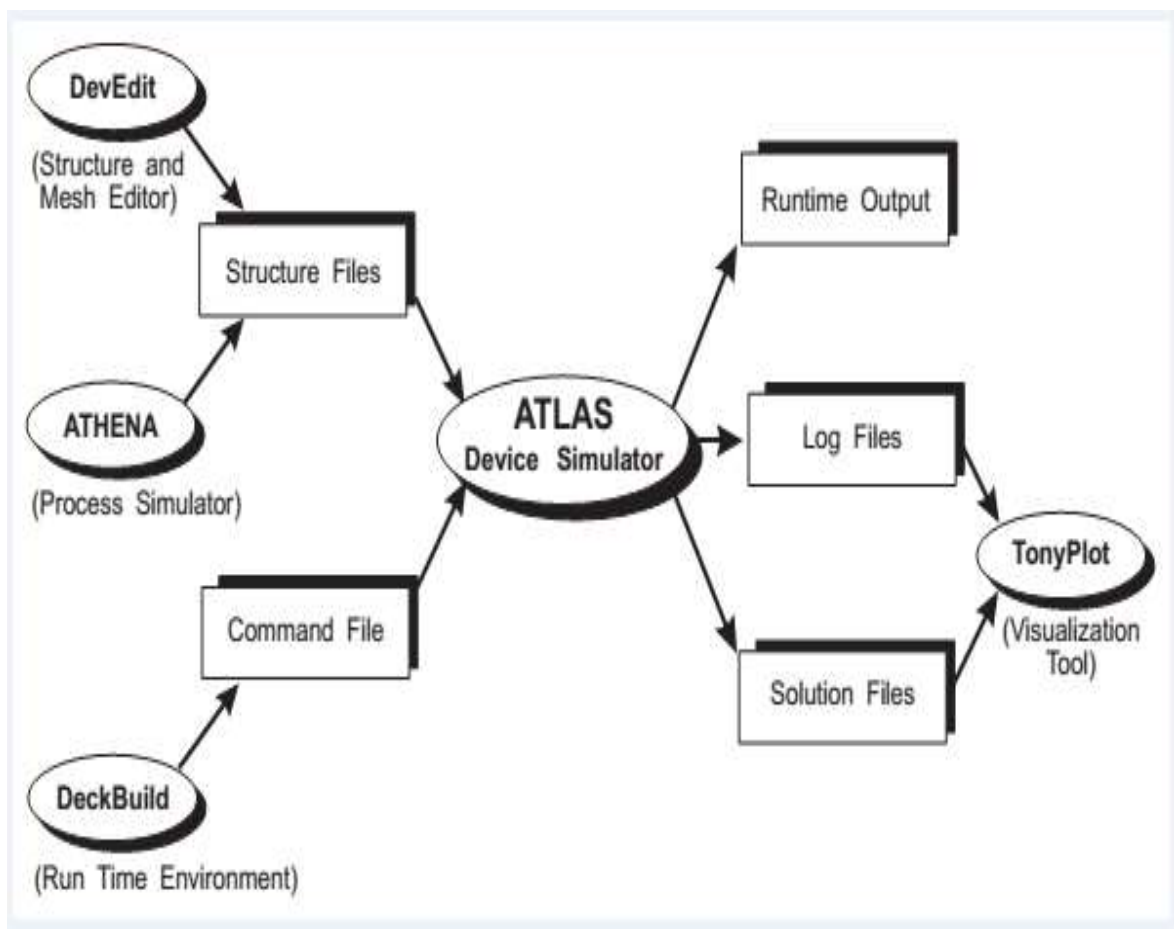


Figure 3.10 : ATLAS entrées et sorties [15]

Dans le schéma de la figure (3.10) nous voyons les types d'informations à l'entrée et à la sortie « d'Atlas ». La plupart des simulations réalisées par « Atlas » utilisent deux fichiers d'entrée. Le premier fichier est un fichier script contenant les commandes pour qu'Atlas s'exécute (représenté par « Fichier de commande »).

Le second fichier est un « Fichier de structure » qui définit la structure qui va être simulée. A la sortie « d'Atlas », nous avons trois types de fichiers. Le premier de ces fichiers est la sortie « Runtime » qui donne la progression, les erreurs et les messages d'avertissements pendant la simulation. Le deuxième type de fichier est le fichier « log » qui stocke toutes les valeurs de tensions et des courants provenant de l'analyse du dispositif simulé (c'est le fichier du comportement électrique). Le troisième fichier de sortie est le « Fichier de solution », ce fichier stocke les données 2D ou 3D concernant les valeurs des variables solutions dans le dispositif en un point donné (nœud) de la structure (c'est le fichier physique, il contient la structure dans un état particulier). Les deux derniers fichiers sont traités par l'outil de visualisation « TonyPlot » [16]

3.3.3 Logique de programmation

Après la présentation de l'outil de simulation ATLAS, sa composition interne et son fonctionnement, nous allons maintenant présenter l'ordre des commandes propres à la logique de programmation dans ce simulateur

Groupe		Commandes
1. Spécification de la structure	—————	MESH REGION ELECTRODE DOPING
2. Spécification des modèles des matériaux	—————	MATERIAL MODELS CONTACT INTERFACE
3. Sélection de la méthode	—————	METHOD
4. Spécification des solutions	—————	LOG SOLVE LOAD SAVE
5. Analyse des résultats	—————	EXTRACT TONYLOT

Figure.3.11: Ordre des groupes de commandes fondamentales dans le logiciel ATLAS [15]

1- Spécification de la structure

Maillage

Dans un programme ATLAS, la première des choses qu'on doit définir est le maillage de la structure. « MESH » est la commande qui suit directement la commande de lancement du Simulateur ATLAS « go Atlas », elle définit le maillage au niveau des différentes zones de la structure.

Les régions

Après avoir défini le maillage, il est nécessaire de définir les régions dont le format de définition des régions est le suivant:

REGION nombre = < integer > < material_type > / < position des paramètres >

Les régions doivent être numérotées du 1 jusqu'au maximum nombre de régions existantes sur la structure. Sur le simulateur Atlas il est possible de représenter jusqu'à 55 régions différentes.

Les électrodes

« Atlas » a une limite de 50 électrodes qui peuvent être définies. Le format de définition d'électrodes est comme suit:

ELECTRODE NAME = < nom de l'électrode > < position des paramètres >

Le dopage :

Le dernier aspect de la spécification de la structure qui doit être défini est le dopage. Le format de la déclaration de dopage dans « Atlas » se présente comme suit:

DOPAGE < type de distribution > < type de dopant > / < position des paramètres >

Le dopage peut être uniforme ou gaussienne.

2- Spécification des matériaux et des modèles

Après la définition de la structure, il faut spécifier les modèles des matériaux, elle se compose de quatre parties : matériau, modèles, contact et interface.

Le matériau

Le format de la déclaration du matériau est le suivant :

MATERIAL < localisation > < définition du matériau >

Modèles

Les modèles physiques sont classés en cinq catégories:

Mobilités des porteurs de charges, mécanismes de génération-recombinaison, les statistiques de transport, l'ionisation par impact et l'effet tunnel.

La syntaxe de la déclaration du modèle est la suivante:

MODEL< paramètres générales > / < paramètres du modèle >

Le choix du modèle dépend des matériaux choisis pour la simulation.

Contact

Le contact détermine les attributions des électrodes. La syntaxe du contact est la suivante :

Contact nombre = < n > | NOM = <ename> | ALL

Cette expression montre la déclaration « contact ».

Interface

Les limites du semi-conducteur ou de l'isolant sont déterminées dans la déclaration d'interface. La syntaxe est la suivante:

INTERFACE [<parameters>]

3-Sélection des Méthodes numériques

Le Simulateur Atlas peut utiliser plusieurs méthodes numériques pour calculer les solutions des équations pendant l'exécution du programme. Pour les différents modèles qui existent il y a trois types de méthodes de résolutions techniques :

- La Méthode de GUMMEL
- La Méthode de NEWTON
- La Méthode BLOCK

Pour la méthode de GUMMEL, elle est utilisée pour la résolution des équations a une seule inconnue et des variables fixées constantes, la résolution se faite d'une manière itérative jusqu'à la solution est achevée. La deuxième méthode de NEWTON est la méthode la plus répandu dans le programme Atlas, elle est utilisée pour résoudre des systèmes d'équations à plusieurs inconnues. La troisième méthode est une combinaison des deux méthodes, elle est utiles pour les systèmes d'équation mixtes.

4-Sélection des paramètres à extraire

Après avoir sélectionné la méthode numérique, il est nécessaire de déterminer les solutions. La spécification de solution est donnée par les déclarations : LOG, SOLVE, LOAD, et SAVE.

LOG : permet à toutes les caractéristiques finales de simulation d'être sauvées dans un fichier (ouvre un fichier de type log).

Notons que log en minuscule veut dire le type de fichier et LOG en majuscule veut dire la commande dans le programme. Les informations sauvées sont de type électrique. Aussi n'importe quel paramètre spécifié par la commande PROBRE est stocké dans le fichier de type log. Si dans le programme, il y a plusieurs commandes LOG, chaque fois le fichier log qui a été ouvert avant est fermé et un nouveau fichier log est ouvert.

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

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

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

5-Analyse des résultats

Une fois la solution a été trouvée pour un problème de dispositif à semi-conducteurs, les informations peuvent être affichées graphiquement.

EXTRACT : les commandes de ce type sont utilisées pour extraire les valeurs bien précises des paramètres des deux types des fichiers log ou structure.

TONYPLOT : démarre le programme « TonyPlot » permettant une représentation graphique des données.

Une autre commande importante est BEAM, sa position est au niveau 4 des groupes de commande. BEAM indique un signal d'entrée optique sous forme d'un faisceau de lumière (mono ou multi-spectrale). Le faisceau ainsi déclaré est allumé et utilisé par la commande SOLVE, dans ce cas le module Luminous est activé. Donc BEAM est utilisé pour simuler des courants sous lumière ou des réponses spectrales.

3.3.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté une description relativement détaillée sur les logiciels de simulation AMPS-1D et SILVACO. Nous avons défini ses structures, ses outils et ses capacités permettant de calculer tous les paramètres internes et externes liés à la cellule solaire et générer ainsi ses caractéristiques électriques comme la densité du courant de court circuit, la tension en circuit ouvert, le facteur de forme et le rendement de conversion; Ainsi elle est nécessaire pour l'optimisation des structures des dispositifs photovoltaïques.

Références bibliographiques du chapitre 3 :

- [1] S Fonash. Solar Cell Device Physics. 2ème Edition, 2010.
- [2] Y Liu, Y Sun, and A Rockett. « A New simulation software of solar cells with xAMPS ». Solar Energy Materials and Solar Cells, 98:124–128, 2012.
- [3] K Mangersnes « Back-contacted back-junction silicon solar cells ». Thèse de doctorat, Université d’Oslo, 2010
- [4] F. Khaled « Effet de l'électrode transparente sur les propriétés des cellules solaires en hétérojonction à base de silicium ». Thèse de doctorat, Université de Batna, 2017.
- [5] Henry Mathieu. Physique des semiconducteurs et des composants électroniques. Masson, Paris; Milan, 1990.
- [6] Simon M. Sze and Kwok K. Ng. Physics of Semiconductor Devices. John Wiley & Sons, 2006
- [7] N. Palit « Amorphous silicon based solar cells: experimental characterisation and computer modeling ». PhD thesis, Energy Research Unit, Indian Association for the Cultivation of Science, Jadavpur, Calcutta, India, 2000
- [8] Yiming Liu, Daniel Heinzl, and Angus Rockett. A revised version of the AMPS simulation code. In Photovoltaic Specialists Conference (PVSC), 2010 35th IEEE, pages 001943–001947. IEEE, 2010.
- [9] AMPS 1D site web, université de Pennsylvanie: <http://www.emprl.psu.edu/amps>
- [10] N. Toufek « Contribution à l'étude d'une cellule solaire en couches minces à base de CuLi-xGaxSe_2 ». Thèse Doctorat en Sciences Electronique. Université des Frères Mentouri Constantine .2015.
- [11] M. Boukaraba, H. Zorrig « Effet de la couche buffer dans les cellules solaires Tandem à base de CIGS » Mémoire de Master, Université de Mohamed Boudiaf -M'sila, Année 2017.
- [12] Source VWF : <http://www.engr.sjsu.edu/dparent/Silvaco/vwf2.pdf>
- [13] F. Bouaraba « Etude d'une LED à base d'InGaN pour l'émission de la lumière blanche ». Thèse de Magister, Université Mouloud Mammeri de Tizi Ouzou, 2012.
- [14] Y. Marouf « Modélisation des cellules solaires en InGaN en utilisant Atlas Silvaco ». Thèse Magister, Université Mohamed Khider – Biskra, 2013
- [15] Atlas user's manual, Silvaco international, 2004.

[16] P. Michalopoulos « A novel approach for the development and optimization of state of the art photovoltaic devices using SILVACO ». Thesis Naval post graduate school Monterey California, 2002.

CHAPITRE 4

RESULTATS ET DISCUSSIONS

4.1 Introduction

Le but de l'étude de simulation est de comprendre physiquement la structure développée d'une cellule solaire donnée et d'analyser la tension du circuit ouvert V_{co} , le courant de court circuit J_{sc} , le facteur de forme FF et le Rendement de conversion η . Pour cela, il est nécessaire d'utiliser un logiciel capable de simuler les paramètres d'une telle cellule. Les logiciels les plus utilisés pour la simulation numérique sont PC 1D, ISE TCAD Silvaco, Afors-het et AMPS 1D.

Le présent chapitre se divise en deux parties. Dans la première partie nous nous intéresserons à la simulation d'une cellule solaire à base de SiGe en utilisant le simulateur unidimensionnel AMPS 1D. Dans la deuxième partie du chapitre, nous essayons d'augmenter le rendement de la cellule précédente, on ajoutant une couche antireflet en silicium poreux sur la face avant en utilisant le logiciel SILVACO-ATLAS.

Partie I : Simulation d'une cellule solaire à base de SiGe avec AMPS 1D

4.2. Structure de la cellule solaire utilisée

La structure à étudier est composée essentiellement d'une jonction p-n à base de (SiGe) sur laquelle est déposée une couche fenêtre Si (Windows layer) fortement dopée de type p, utilisée dont le but de réduire et minimiser la vitesse de recombinaison superficielle (en surface) et de minimiser la résistance série entre l'électrode et la jonction. On a inséré également une couche BSF (Back Surface Field) fortement dopée de type n.

On note que le rôle de la région BSF, à l'arrière de la cellule est de créer une barrière de potentiel (dans ce cas, jonction $n^+ - n$) sur la face arrière de la cellule pour assurer une passivation. La barrière de potentiel induite par la différence de niveau de dopage entre la base et le BSF tend à confiner les porteurs minoritaires dans la base. Ce qui minimise la recombinaison dans l'arrière de la cellule [1]. Un schéma de la structure est illustré dans la figure 4.1.

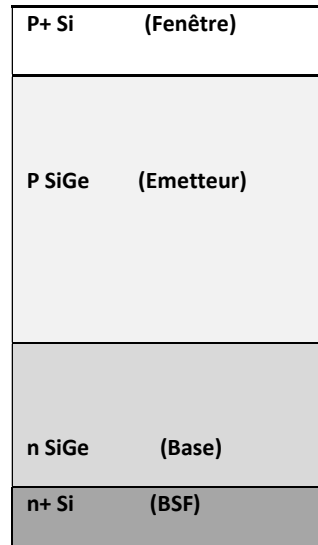


Figure 4.1 : Le schéma de la cellule simulée à base de SiGe

Notons que la structure a été étudiée sous spectre solaire AM1.5, avec $P=1000\text{W}/\text{cm}^2$, et à température ambiante $T=300^\circ\text{K}$.

4.3 Paramètres de simulation

Les paramètres de SiGe sont définis à partir des équations suivantes: [2, 3, 4, 5, 6]

- Le gap énergétique E_g

Le silicium et le germanium cristallins sont des matériaux à bande interdite indirecte, c'est-à-dire que le maximum de bande de valance et le minimum de bande de conduction sont à une position différente dans l'espace k. Casado et Ruiz [4] ont proposé l'équation (gap énergétique E_g) suivante avec fraction molaire Ge(x) dans l'alliage $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$.

Pour $x < 0,87$:

$$E_{g_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x}} = (1 - x)E_{g_{\text{Si}}} + xE_{g_{\text{Ge}}} - \beta_j x(1 - x) \quad (4.1)$$

Où : $E_{g_{\text{Si}}}$ et $E_{g_{\text{Ge}}}$ sont l'énergie de gap pour les matériaux Si et Ge, x est la fraction molaire, $\beta_j = 0,25 \text{ eV}$ est le facteur de flexion pour les matériaux à bande interdite indirecte.

- La constante diélectrique ϵ_r

$$\epsilon_{r_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x}} = 11,9 + 4,1x \quad (4.2)$$

- **Mobilité des électrons**

$$\mu_n(x) = 1500(1 - x) + 3900x \quad (4.3)$$

- **Mobilité des trous**

$$\mu_p(x) = 450(1 - x) + 1900x \quad (4.4)$$

- **Densité effective des états dans la bande de conduction N_c**

$$N_c = 5,3 \cdot 10^{15} x T^{3/2} \quad (4.5)$$

- **Densité effective des états dans la bande de valence N_v**

$$N_v = 2 \cdot 10^{15} x T^{3/2} \quad (4.6)$$

- **L'affinité électronique χ**

$$\chi_{Si1-xGex} = 4,05(1 - x) + 3900x \quad (4.7)$$

- **Coefficient d'absorption α**

$$\alpha = A \left[\frac{(h\nu - E_g - \bar{E}_{ph})^2}{1 - \exp\left(-\frac{\bar{E}_{ph}}{KT}\right)} + \frac{(h\nu - E_g - \bar{E}_{ph})^2}{\exp\left(-\frac{\bar{E}_{ph}}{KT}\right) - 1} \right] \quad (4.8)$$

Où :

E_{ph} : Energie de photon.

E_g : Energie de gap.

K : Constante de Boltzman.

T : Temperature

$$A(x) = 3200(1 - 1,161x + 9,581x^2),$$

$$\bar{E}_{ph} = 0,050(1 + 0,026x - 1,066x^2)$$

Les valeurs de ces différents paramètres sont rassemblées dans le Tableau 4.1.

Notre travail consiste à optimiser une cellule solaire à base de SiGe avec une fraction molaire $x=0.25$ et à simuler ces paramètres électriques, optiques et géométriques afin de concevoir une cellule ayant le rendement électrique optimal.

Tableau 4.1 : Paramètres de simulation pour la structure simulée

	P+ Si	P SiGe	n SiGe	n+ Si
Épaisseur (µm)	[0.1-04]	[4-7]	[4-7]	[0.1-04]
Constant diélectrique, ϵ_r	11.9	12.93	12.93	11.9
Mobilité des électrons (cm²/Vs)	1350	2110	2110	1350
Mobilité des trous (cm²/Vs)	450	812	812	450
Densité de porteurs, n ou p (cm⁻³)	P:[1E18-5E19]	P:[1E17-1E18]	n:[1E17-5E18]	n:[1E18-5E19]
Bande interdite, (eV)	1.12	0.96	0.96	1.12
Densité effective, Nc	2.8E19	2.5 E20	2.5 E20	2.8E19
Densité effective, Nv	1.04E+19	2.5 E20	2.5 E20	1.04 E+19
Affinité électronique, χ (eV)	4.05	3.92	3.92	4.05

4.4 Influence des paramètres de l'émetteur sur les performances de la cellule [7]

Pour déterminer l'effet des paramètres technologiques (l'épaisseur et le dopage) sur les caractéristiques électriques de la cellule solaire, nous choisissons d'étudier premièrement les paramètres de la couche émettrice.

4.4.1 L'effet de l'épaisseur de l'émetteur

Pour étudier l'effet de l'épaisseur de l'émetteur, sur les paramètres de la cellule solaire, nous avons fixé les épaisseurs de la couche fenêtre, de la base et de la BSF et nous avons fait varier l'épaisseur de l'émetteur (X_E) entre la gamme de 4 à 7 μm .

- Courant de court circuit

La figure 4.2 présente l'effet de l'épaisseur de l'émetteur sur la densité du courant de court circuit

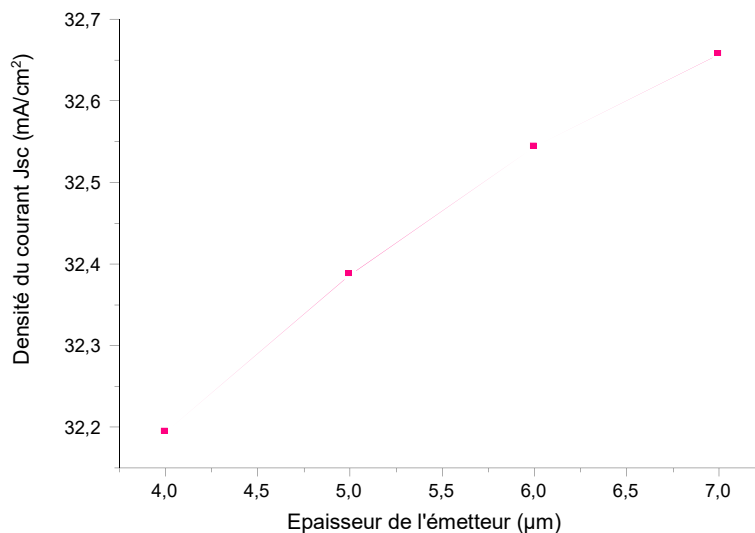


Figure 4.2 : Influence de l'épaisseur de l'émetteur sur la densité du courant de court circuit

D'après cette figure la densité de courant de court-circuit J_{sc} croit avec l'augmentation de l'épaisseur de l'émetteur, et atteint une meilleure valeur $32.7 \text{ mA}/\text{cm}^2$ à l'épaisseur $X_E = 7\mu\text{m}$.

- **Tension en circuit ouvert**

Sur la figure 4.3, nous représentons la variation de la tension en circuit ouvert en fonction de l'épaisseur de l'émetteur. Nous remarquons que la tension en circuit ouvert n'est pas affectée par la modification de l'épaisseur de l'émetteur et sa valeur reste aux alentours de 680 mV.

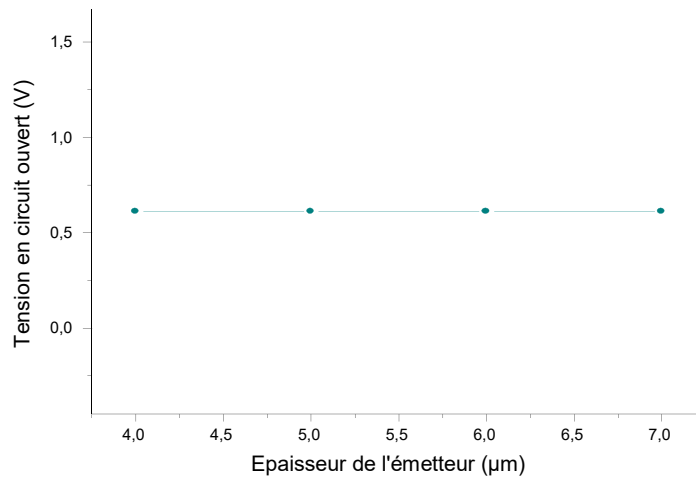


Figure 4.3 : Influence de l'épaisseur de l'émetteur sur la tension en circuit ouvert.

- **Rendement**

Dans la figure 4.4, nous avons rapporté la variation du rendement de la cellule en fonction de l'épaisseur de l'émetteur

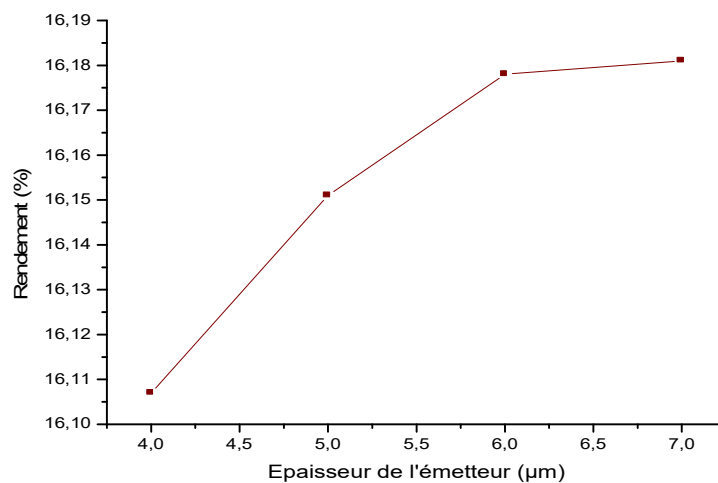


Figure 4.4 : Influence de l'épaisseur de l'émetteur sur rendement

La courbe montre que l'augmentation de l'épaisseur de la l'émetteur permet une amélioration sur le rendement de la cellule, elle a un effet direct sur l'amélioration du rendement de conversion de la cellule qui croit entre 16.11% à 16.18% justifie par l'augmentation du courant.

La valeur de l'épaisseur de l'émetteur qui donne le meilleur rendement de conversion est de $7\mu\text{m}$.

4.4.2 L'effet du dopage de l'émetteur

De même, pour étudier l'influence du dopage de l'émetteur sur les différents paramètres de la cellule solaire, nous avons varié le niveau du dopage de l'émetteur entre 10^{17} à 10^{18} cm^{-3} avec l'épaisseur ($X_E = 7 \mu\text{m}$)

- Courant de court circuit

Dans la figure 4.5, on illustre la variation du rendement en fonction du dopage de la couche de l'émetteur de la cellule.

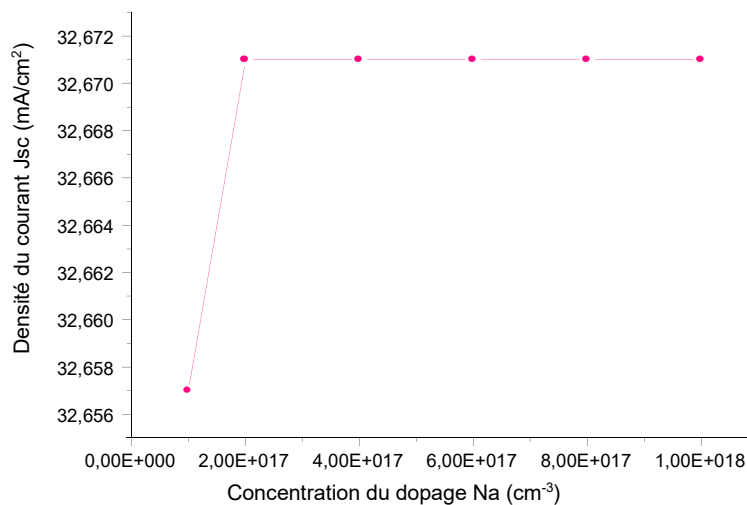


Figure 4.5 : L'influence du dopage de l'émetteur sur la densité du courant de court circuit

D'après cette figure, Nous distinguons deux zones principales:

- La zone I, où le courant de court circuit augmente linéairement de 32.65mA jusqu'à 32.671mA.
- La zone II, où il y a saturation et le courant reste constant aux alentours de 32.671mA. Ceci est justifié par l'augmentation du courant dus à l'augmentation de la bande spectrale d'absorption des photons et qui entraine par la suite une augmentation du nombre des porteurs de charge créés et collectés.

- **Tension en circuit ouvert**

L'étude de la variation de la tension en circuit ouvert en fonction du dopage de l'émetteur donne les résultats représentés sur la figure 4.6.

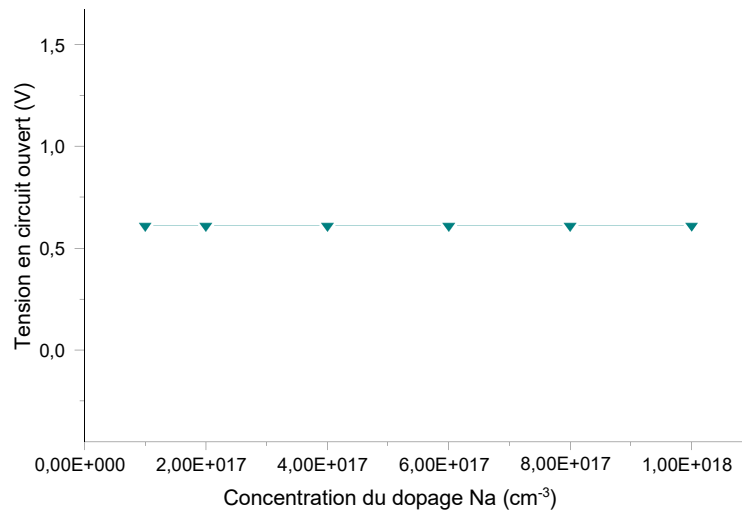


Figure 4.6 : Influence du dopage de l'émetteur sur la tension en circuit ouvert

Nous remarquons sur cette figure une saturation de la courbe c.à.d. la tension en circuit ouvert reste constant à 0.61 V.

- **Le rendement**

Dans cette partie, nous avons variés le dopage de l'émetteur dans une gamme de 10^{17} à 10^{18} cm⁻³. On a tracé la variation du rendement de conversion en fonction du dopage sur la figure 4.7, ou la variation du rendement est remarquable.

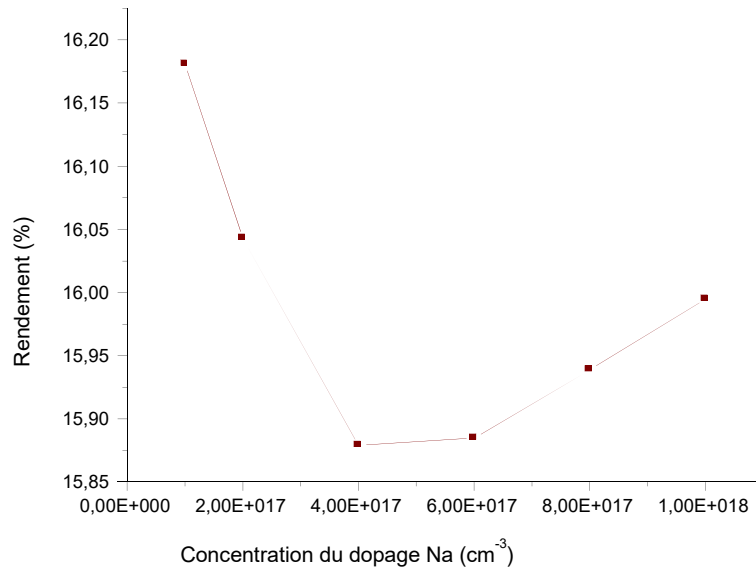


Figure 4.7 : Influence du dopage de l'émetteur sur le rendement

Nous distinguons l'existence de deux zones sur celle-ci :

- La zone I, où le rendement diminue linéairement de 16.19% jusqu'à 15.86%.
- La zone II, où il y a une petite augmentation du rendement jusqu'à 16.03%.

On remarque qu'il y a une contradiction entre les résultats de courant et le rendement pour cette raison on a étudié l'influence du dopage de l'émetteur sur le facteur de forme.

- Le facteur de forme

L'étude de la variation du facteur de forme en fonction de dopage de l'émetteur donne les résultats représentés sur la figure 4.8.

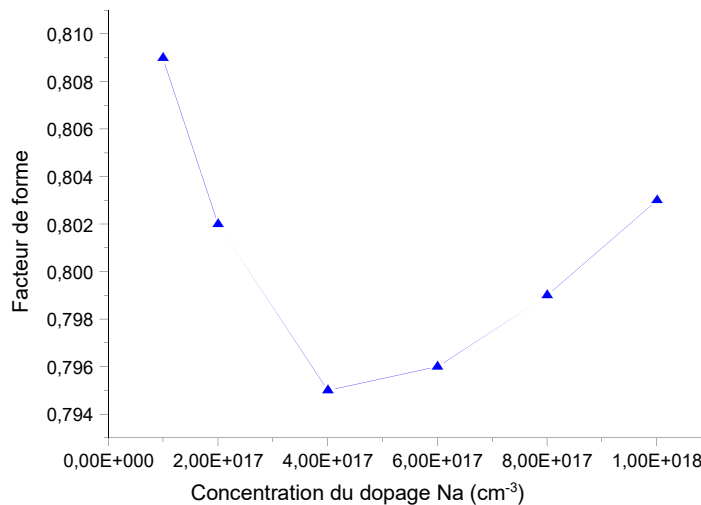


Figure 4.8 : Influence du dopage de l'émetteur sur le facteur de forme.

La figure 4.7 montre que le rendement prend presque la même configuration que la variation de facteur de forme, et on remarque qu'il prend sa valeur optimale pour une épaisseur 7 μm et un dopage 210^{17}cm^{-3} .

4.5 Influence des paramètres de la base sur les performances de la cellule

Après avoir optimisé les paramètres de l'émetteur, nous avons étudié l'influence des paramètres de la base (le dopage, et l'épaisseur) sur les performances de la cellule. Nous rappelons que les paramètres de la couche de l'émetteur sont maintenus fixes c'est-à-dire égales aux valeurs optimales retenues en (4.4).

4.5.1 L'effet de l'épaisseur de la base

Pour étudier l'effet de l'épaisseur de la base sur les performances de la cellule solaire, nous avons varié l'épaisseur de la base avec une concentration du dopage fixe ($N_d = 510^{18} \text{cm}^{-3}$) et nous avons fixé les épaisseurs de la couche émettrice (à la valeur optimisée), de la couche fenêtre et de BSF.

- Courant de court circuit

La figure 4.9 représente la variation du courant de court circuit de la cellule solaire en fonction de l'épaisseur de la base.

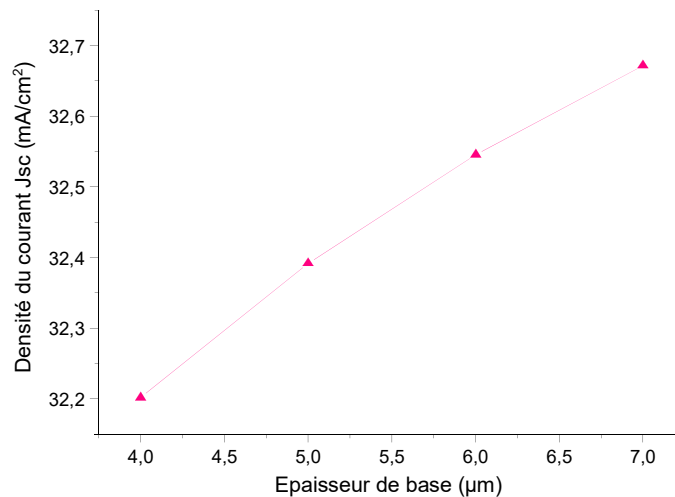


Figure 4.9 : Influence de l'épaisseur de la base de sur la densité du courant de court circuit.

Dans cette figure, on peut voir que l'augmentation de l'épaisseur de la base entraîne une augmentation du courant de court circuit du dispositif. Justifié par l'augmentation de l'épaisseur peut donc permettre une efficacité d'absorption des photons plus importante mais pas une meilleure rendement de collecte des charges

- Tension en circuit ouvert

Dans la figure 4.10, nous avons rapporté la variation de la tension en circuit ouvert en fonction de l'épaisseur de la base.

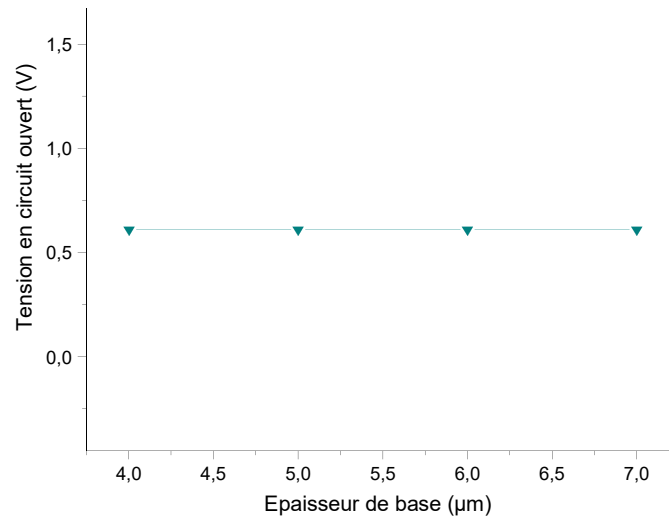


Figure 4.10 : Influence de l'épaisseur de la base sur la tension en circuit ouvert.

Nous remarquons sur cette figure une saturation de la courbe c.à.d. la tension en circuit ouvert est pratiquement constante à 0,61 V. On peut conclure que la variation d'épaisseur n'influe pas sur la tension.

- Rendement

Pour optimiser les paramètres de la base offrant le rendement de conversion photovoltaïque optimal, on a varié l'épaisseur de la base. Les résultats obtenus sont illustrés dans la figure 4.11.

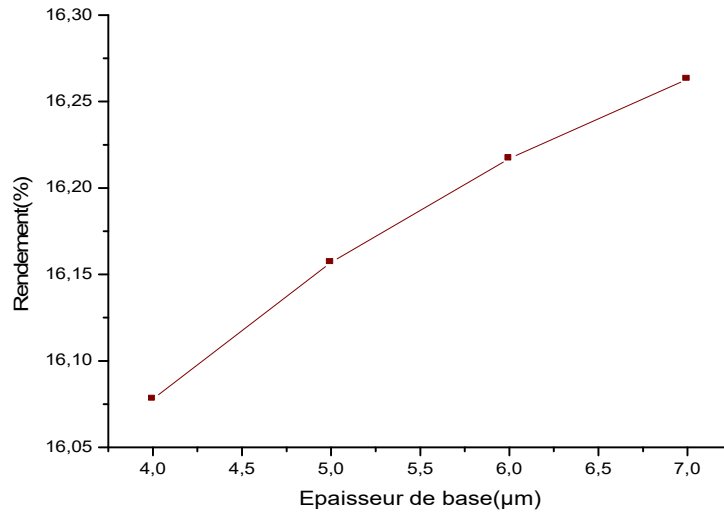


Figure 4.11 : Influence de l'épaisseur de la base sur le rendement

Cette figure montre que l'évolution de l'épaisseur de la base influe directement sur le rendement de conversion. Il est clair que le rendement η augmente de 16.076% jusqu'à 16.260%, quand l'épaisseur passe de 4 à 7 μm .

D'après les résultats obtenus, nous pouvons conclure que l'épaisseur de la base est un facteur important pour l'absorption des photons.

4.5.2 L'effet du dopage de la base

Dans cette partie, nous avons varié le dopage de la base entre 10^{17} à $5.10^{18} \text{ cm}^{-3}$ avec une épaisseur fixe ($X_B = 7 \mu\text{m}$) et nous avons fixé les épaisseurs et les concentrations du dopage de la couche fenêtre, de l'émetteur (à la valeur optimisée) et de la couche BSF.

- Courant de court circuit

Dans la figure 4.12, on illustre la variation de la densité du courant de court circuit en fonction du dopage de la base de la cellule.

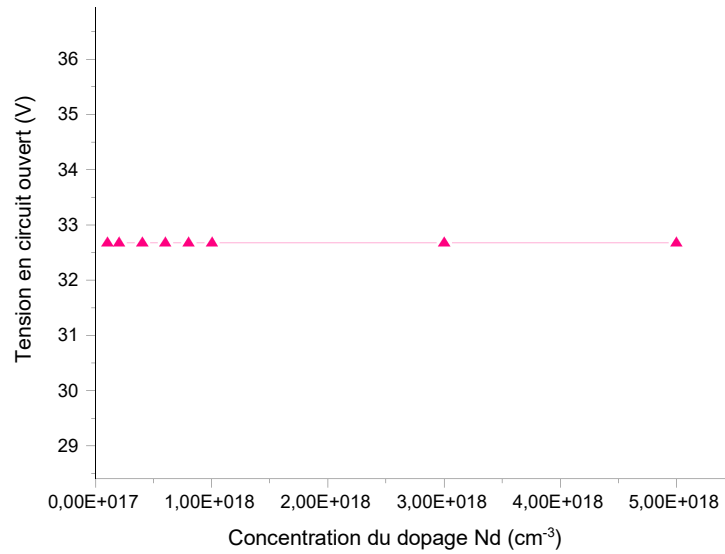


Figure 4.12 : Influence du dopage de la base sur la densité du courant de court circuit

A partir de cette figure, nous observons que pour des valeurs de concentration donneur simulés d'environ $[10^{17}$ à $5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}]$ il y a une décroissance presque négligeable de la densité du courant de court circuit.

- Tension en circuit ouvert

L'étude de la variation de la tension en circuit ouvert en fonction du dopage de la base donne les résultats représentés sur la figure 4.13.

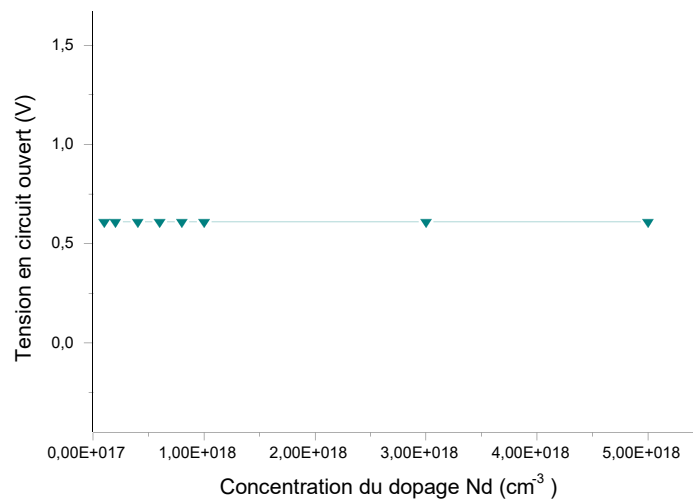


Figure 4.13: Influence du dopage de la base sur la tension en circuit ouvert

. Sur les figures 4.13 nous remarquons qu'aussi il n'est pas une variation remarquable de tension en circuit ouvert avec la variation du dopage de la base. Donc on a étudié l'influence du dopage sur le facteur de forme

- **Facteur de forme**

La figure 4.14 représente l'évolution du facteur de forme en fonction de l'épaisseur de la base.

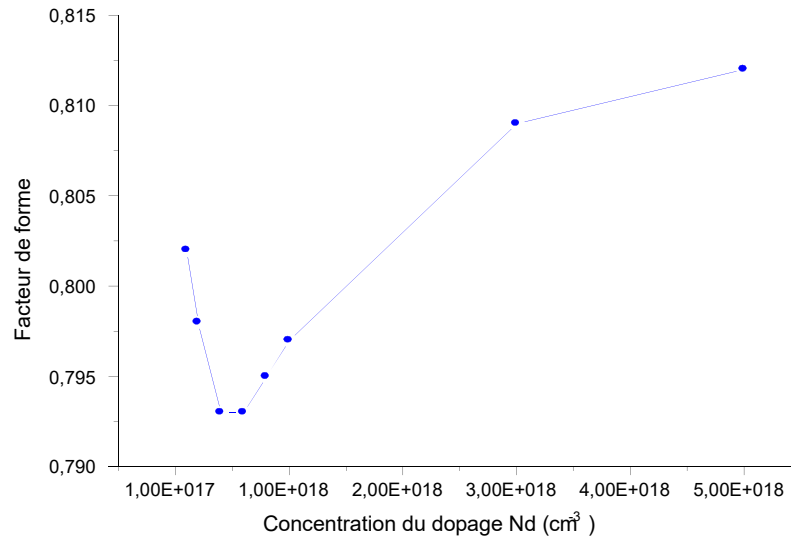


Figure 4.14 : Influence du dopage de la base sur le facteur de forme

Nous distinguons l'existence de trois zones sur la figure 4.14:

- Zone I : $10^{17} < Nd < 5.10^{17} \text{cm}^{-3}$, Une décroissance rapide du facteur de forme.
- Zone II : $5.10^{17} < Nd < 3.10^{18} \text{cm}^{-3}$, Une croissance moins du facteur de forme.
- Zone III : $3.10^{18} < Nd < 5.10^{18} \text{cm}^{-3}$, une pente douce de la courbe puis une saturation vers le meilleur facteur de forme.

- Rendement

L'influence du dopage de la base sur le rendement, est représentée sur la figure 4.15.

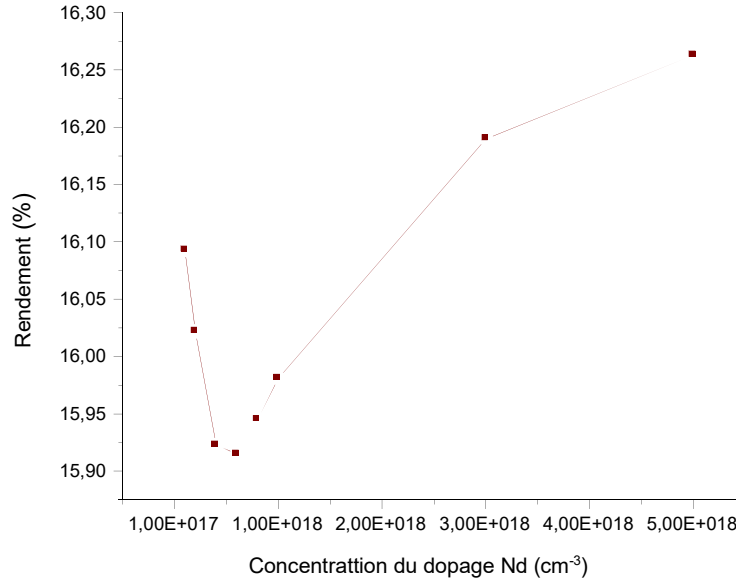


Figure 4.15 : Influence du dopage de la base sur le rendement

Nous remarquons l'existence de trois zones sur celle-ci :

- Zone I: Le rendement décroît rapidement dans une gamme de dopage comprise entre $[10^{17} - 5.10^{17} \text{cm}^{-3}]$
- Zone II: Le rendement augmente moins rapidement dans la gamme de dopage $[5.10^{17} - 3.10^{18} \text{cm}^{-2}]$.
- Zone III: représente une saturation de rendement entre $[3.10^{18} - 5.10^{18} \text{cm}^{-2}]$.

En fin, l'optimisation de la base pour une épaisseur $X_B = 7 \mu\text{m}$ et un dopage $5 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$

4.6 Influence des paramètres de la couche fenêtre sur les performances de la cellule

4.6.1 L'effet de l'épaisseur de la couche fenêtre

Pour étudier l'influence de l'épaisseur de la couche fenêtre sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire, nous avons pris la structure précédente avec un dopage de la couche fenêtre de 10^{18} cm^{-3} et nous avons varié l'épaisseur de $0.1 \mu\text{m}$ jusqu'à $0.4 \mu\text{m}$

- Courant de court circuit

La figure 4.16 représente l'effet de l'épaisseur de la couche fenêtre X_f sur le courant de court circuit

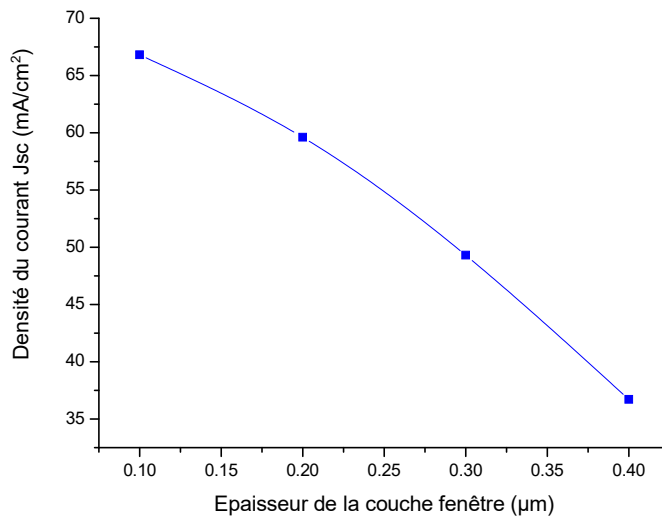


Figure 4.16 : Influence de l'épaisseur de la couche fenêtre sur la densité du courant de court circuit

On remarque clairement une diminution du courant pour la cellule à cause de la vitesse de recombinaison en surface élevée.

- Tension en circuit ouvert

Dans la figure 4.17, nous avons rapporté la variation de la tension en circuit ouvert en fonction de l'épaisseur de la couche fenêtre

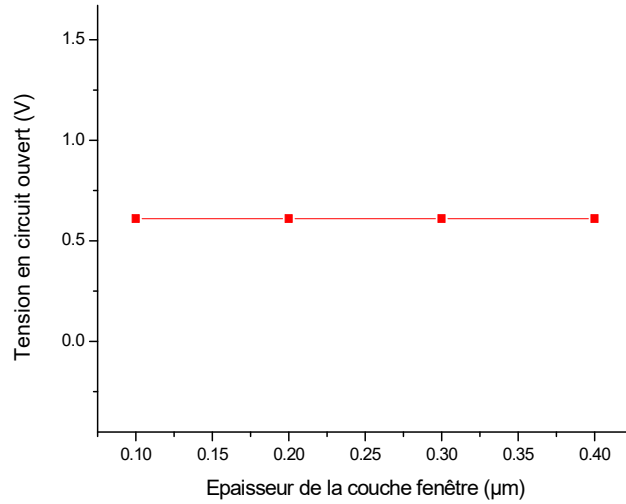


Figure 4.17 : Influence de l'épaisseur de la couche fenêtre sur la tension en circuit ouvert.

Nous remarquons sur cette figure une saturation de la courbe c.à.d. la tension en circuit ouvert est constante à $V_{co}=0.61$ V.

- Rendement

Dans la figure 4.18, nous avons rapporté la variation du rendement de la cellule SiGe en fonction de l'épaisseur de la couche fenêtre.

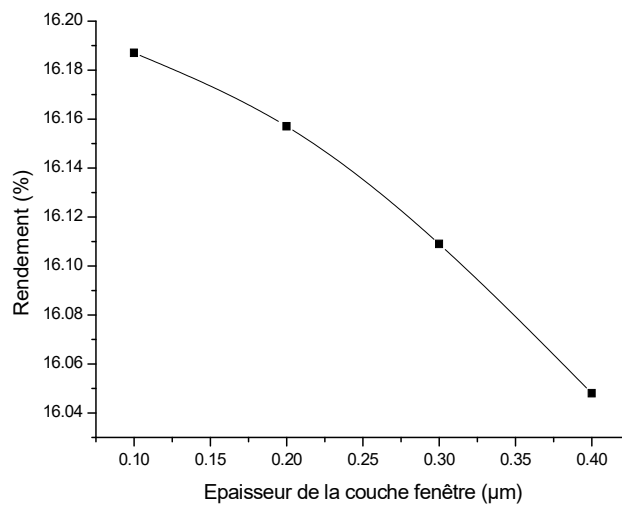


Figure 4.18 : Influence de l'épaisseur de la couche fenêtre sur le rendement

D'après cette figure, on remarque que le rendement diminue avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche fenêtre ceci est justifié par la décroissance du courant qui entraîne par la suite une augmentation de la vitesse de recombinaison. On constate aussi que le meilleur rendement est fourni pour des épaisseurs très minces $X_f = 0.1\mu\text{m}$.

4.6.2 L'effet du dopage de la couche fenêtre

Dans cette partie, nous avons pris la structure précédente avec l'épaisseur de la couche fenêtre à $0.1\mu\text{m}$ et nous avons varié le dopage de cette couche de 10^{18} et $5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$

- Courant de court circuit

Dans la figure 4.19, on illustre la variation du courant de court circuit en fonction du dopage de la couche fenêtre de la cellule.

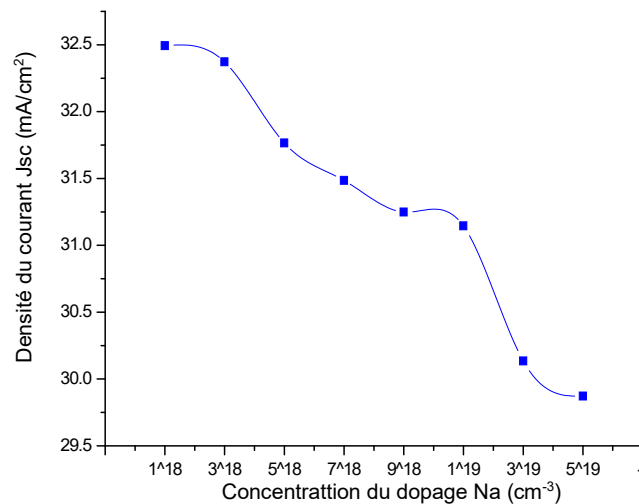


Figure 4.19 : Influence du dopage la couche fenêtre sur la densité du courant de court circuit

On remarque dans la figure 4.19 que la variation de la densité du courant est décroît quasi-linéairement en fonction du dopage de la couche fenêtre. Ceci est Justifié par l'augmentation de la concentration des accepteurs dans la couche fenêtre.

- **Tension en circuit ouvert**

L'étude de la variation de la tension en circuit ouvert en fonction du dopage de la couche fenêtre donne les résultats représentés sur la figure 4.20.

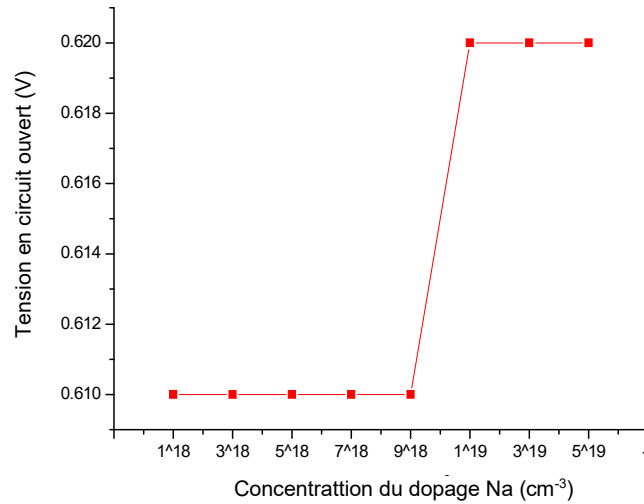


Figure 4.20 : Influence du dopage de la couche fenêtre sur la tension en circuit ouvert

Nous distinguons trois zones principales dans cette figure 4.20:

- La zone I, Une saturation de la courbe où la tension en circuit ouvert est fixe à 0.61 V
- la zone II, où il y a une petite augmentation de la tension en circuit ouvert jusqu'à 0.620V.
- la zone III, où il y a une deuxième saturation de la courbe.

Ceci est justifié par l'augmentation de la valeur de la concentration des porteurs entre la couche fenêtre et la couche émettrice.

- **Rendement :**

La figure 4.21 présente l'effet du dopage de la couche fenêtre sur le rendement de la cellule.

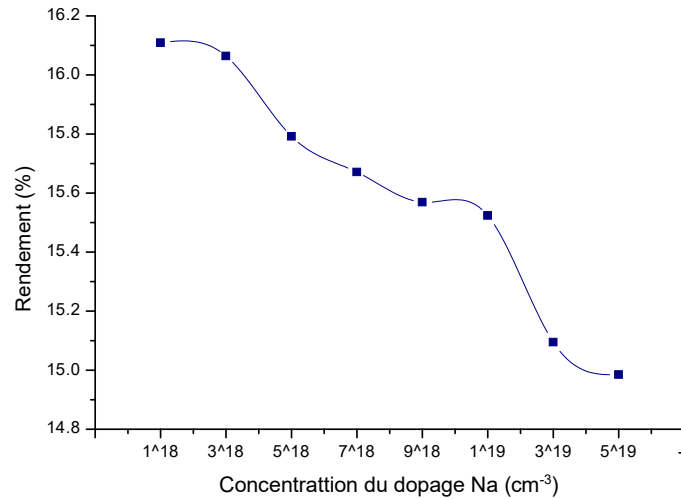


Figure 4.21 : L'influence du dopage de la couche fenêtre sur le rendement

On remarque clairement que l'augmentation du dopage de la fenêtre entraîne à la fois une diminution du rendement de la cellule de 16.187%, pour $Na=1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, à 15.823% pour $Na=5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Ceci est justifié par la grande chute du courant de court circuit.

Nous pouvons conclure, qu'à partir de cette étude sur l'influence des paramètres de la couche fenêtre, que le choix des caractéristiques de cette région peut se porter sur le dopage $Na=10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et l'épaisseur $X_f=0.1 \mu\text{m}$.

4.7 Influence des paramètres de la couche BSF sur les performances de la cellule

Nous avons pris les mêmes paramètres de la cellule et nous avons fait varier les valeurs des deux paramètres (le dopage, puis l'épaisseur) du BSF telles que le dopage Na dans la gamme de $[10^{17} - 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}]$ et l'épaisseur X_{BSF} dans l'intervalle entre $[0.1 - 0.4 \mu\text{m}]$. Nous rappelons que les paramètres de la couche fenêtre, de l'émetteur et de la base sont maintenus fixes.

4.7.1 L'effet de l'épaisseur de la couche BSF

Pour étudier l'effet de l'épaisseur de la couche BSF sur les performances de la cellule solaire nous avons varié l'épaisseur de BSF avec une concentration du dopage fixe ($N_d=5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) et nous avons fixé les épaisseurs et les concentrations du dopage de la couche fenêtre, de l'émetteur et de la base, (à la valeur optimisée).

- **Courant de court circuit**

La figure 4.22 représente l'effet de l'épaisseur de la couche BSF sur la densité du courant de court circuit.

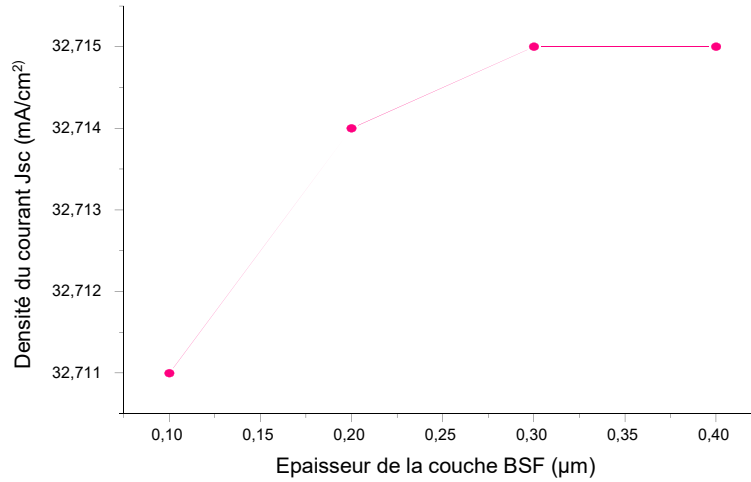


Figure 4.22 : Influence de l'épaisseur de BSF sur la densité du courant de court circuit.

On peut voir sur cette figure, que l'augmentation de l'épaisseur de BSF entraîne une croissance de la densité du courant Jsc de 32.711 mA/cm² à 32.715 mA /cm² dans la gamme [0,1-0,3µm], puis une saturation entre [0,3-0,4µm].

- **Tension en circuit ouvert**

L'étude de la variation de la tension en circuit ouvert en de l'épaisseur de la couche BSF donne les résultats représentés sur la figure 4.23.

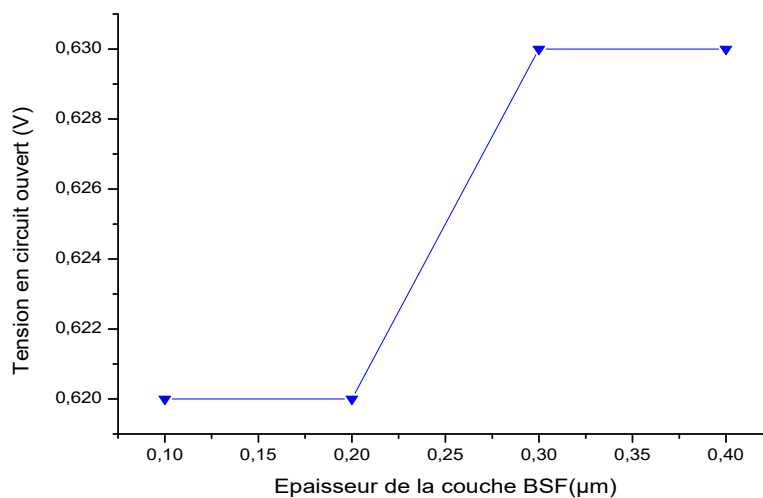


Figure 4.23 : Variation de la tension de circuit ouvert en fonction de l'épaisseur de BSF.

Dans la figure 4.23, nous avons rapporté la variation de la tension en circuit ouvert en fonction de l'épaisseur de la couche BSF. Nous remarquons sur cette figure une augmentation de la tension en circuit ouvert en fonction de l'épaisseur, puis une saturation de la courbe c.à.d. la tension en circuit ouvert reste fixé à $V_{co}=0.63$ V dans la gamme d'épaisseur $[0,3-0,4\mu\text{m}]$.

- Rendement

Dans la figure 4.24, nous avons rapporté la variation du rendement de la cellule SiGe en fonction de l'épaisseur de la couche BSF.

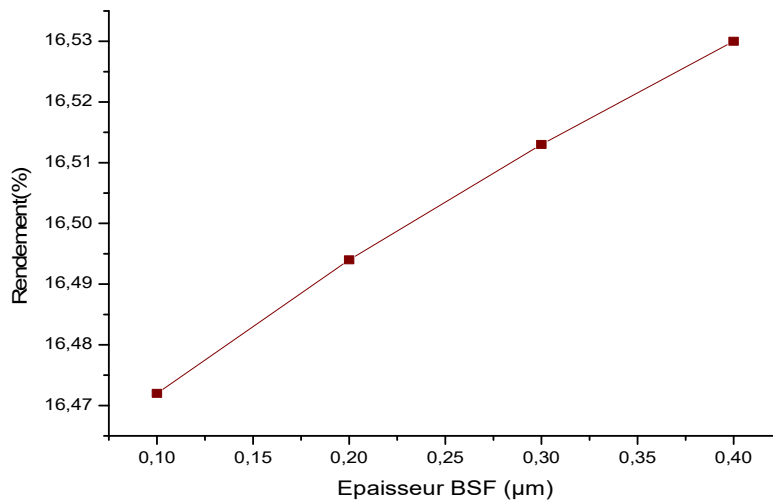


Figure 4.24 : Influence de l'épaisseur de la couche BSF sur le rendement.

On remarque sur cette figure, que la variation de rendement croît linéairement en fonction de l'épaisseur de la couche BSF.

On constate aussi que le meilleur rendement est fourni pour une épaisseur BSF de $X_{BSF} = 0.4\mu\text{m}$.

4.7.2 L'effet du dopage de la couche BSF

Pour étudier l'effet du dopage de la couche BSF sur les performances de la cellule solaire nous avons varié le dopage de BSF avec l'épaisseur fixe ($X_{BSF} = 0.4\mu\text{m}$) et nous avons fixé les épaisseurs et les concentrations du dopage de la couche fenêtre, de l'émetteur et de la base (à la valeur optimisée).

- **Courant de court circuit**

Dans la figure 4.25, on illustre la variation du rendement en fonction du dopage de la couche BSF de la cellule.

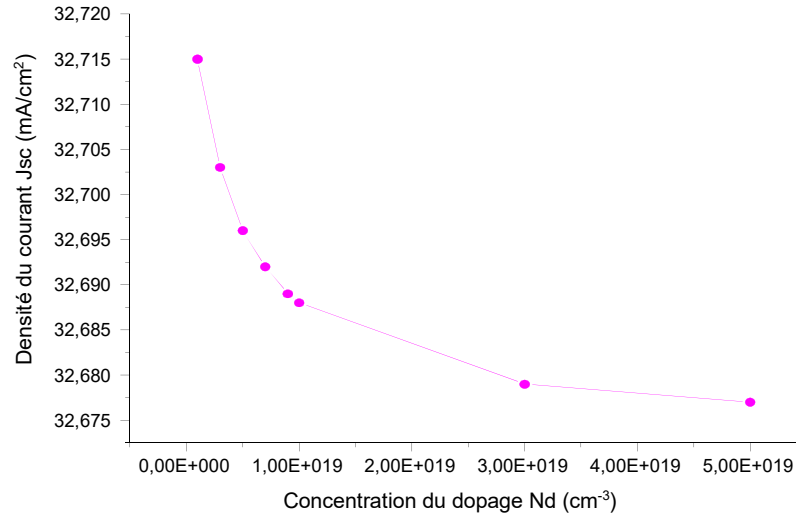


Figure 4.25: Influence du dopage de la couche BSF sur la densité du courant de court circuit

On remarque dans la figure 4.25 que la variation de la densité de courant est décroissante exponentielle en fonction du dopage de la couche BSF. Justifié par l'augmentation de concentration des accepteurs dans la couche BSF.

- **Tension en circuit ouvert**

L'étude de la variation de la tension en circuit ouvert en fonction du dopage de la couche BSF donne les résultats représentés sur la figure 4.26.

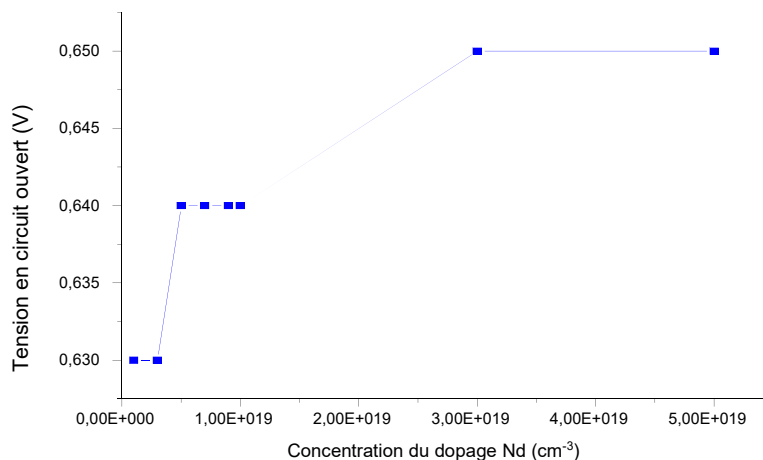


Figure 4.26: Influence du dopage de la couche BSF sur la tension en circuit ouvert

Nous remarquons sur cette figure une augmentation de la tension en circuit ouvert en fonction de dopage de BSF, puis une saturation de la tension pour un BSF fortement dopé.

- Rendement

La figure 4.27 présente l'effet du dopage de la couche BSF sur le rendement de la cellule.

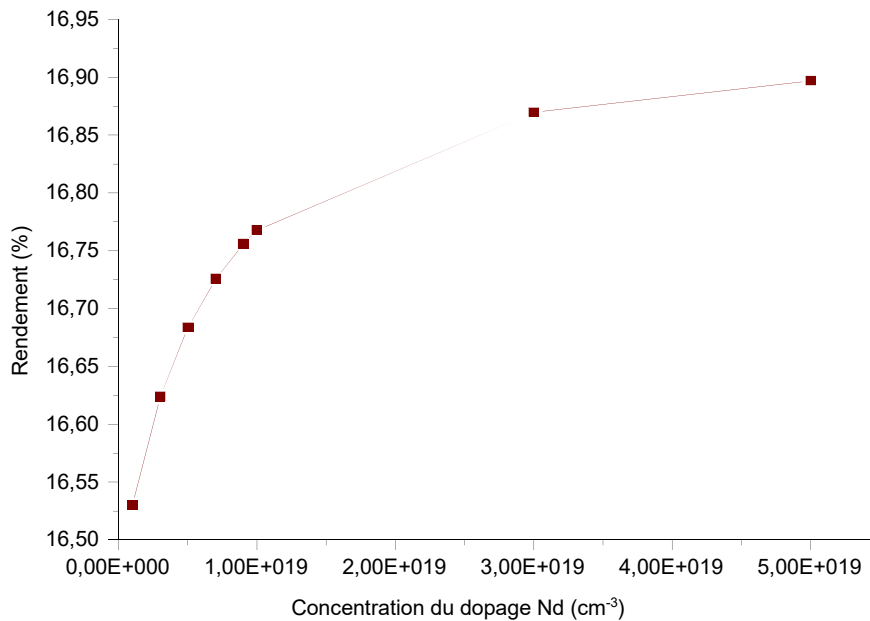


Figure 4.27: Influence du dopage de la couche BSF sur le rendement

On remarque clairement que l'augmentation du dopage de la couche BSF entraîne à la fois une augmentation du rendement de la cellule de 16.530% pour $N_a=1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ à 16.756% pour $N_a=5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Un BSF fortement dopé permet de réduire la recombinaison au niveau du contact métal semi-conducteur

Nous pouvons conclure, qu'à partir de cette étude sur l'influence des paramètres de la couche, que le choix des caractéristiques de cette région peut se porter sur le dopage $N_d=5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ et l'épaisseur $X_{BSF}=0.4 \mu\text{m}$.

4.8 Etude de l'influence de la vitesse de recombinaison sur le rendement de la cellule [8]

Ces simulations ont été faites afin d'étudier l'effet de la vitesse de recombinaison superficielle et la concertation des porteurs de charge sur les grandeurs photovoltaïques de la cellule solaire.

Pour déterminer la valeur optimale du rendement de la cellule SiGe étudié, nous avons choisi une gamme de concentration du dopage de la couche émettrice entre 1×10^{17} à 1×10^{18} avec des vitesses de recombinaison superficielle entre 10^3 à 10^7 (cm.s^{-1}).

4.8.1 Influence de la vitesse de recombinaison sur le rendement de la cellule

La figure 4.28 représente l'effet de la vitesse de recombinaison superficielle sur la densité du courant de court circuit.

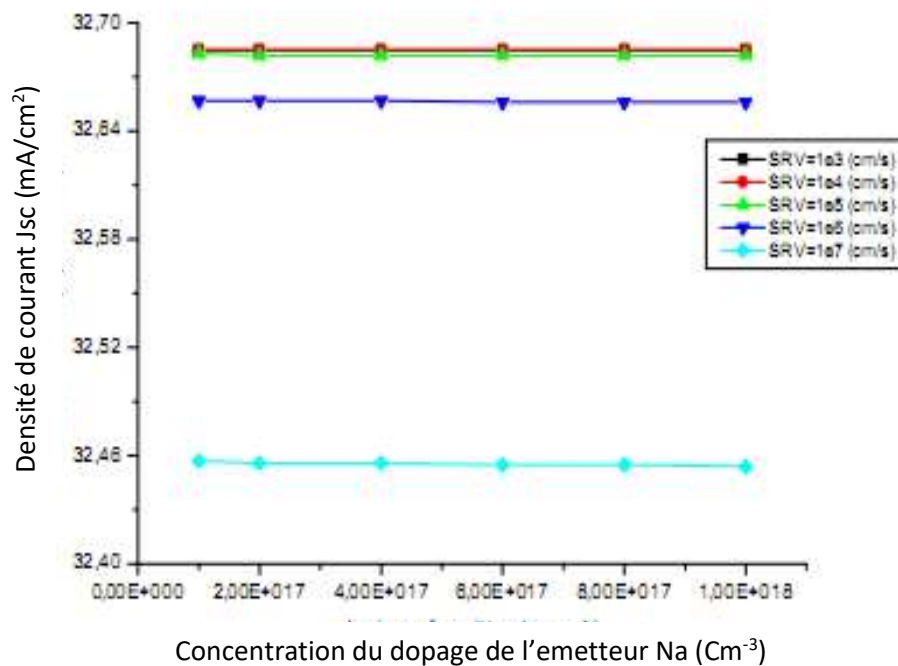


Figure 4.28 : Evolution du courant de court circuit de la cellule en fonction du dopage de l'émetteur avec variation de la vitesse de recombinaison superficielle

Dans cette figure, nous remarquons que le courant de court-circuit ne varie pas en fonction du dopage de l'émetteur. Par contre on observe une augmentation remarquable avec la variation de la vitesse de recombinaison superficielle.

4.8.2 Influence de la vitesse de recombinaison superficielle sur la tension de circuit ouvert

La figure 4.29 représente l'effet de la vitesse de recombinaison superficielle sur la tension en circuit ouvert.

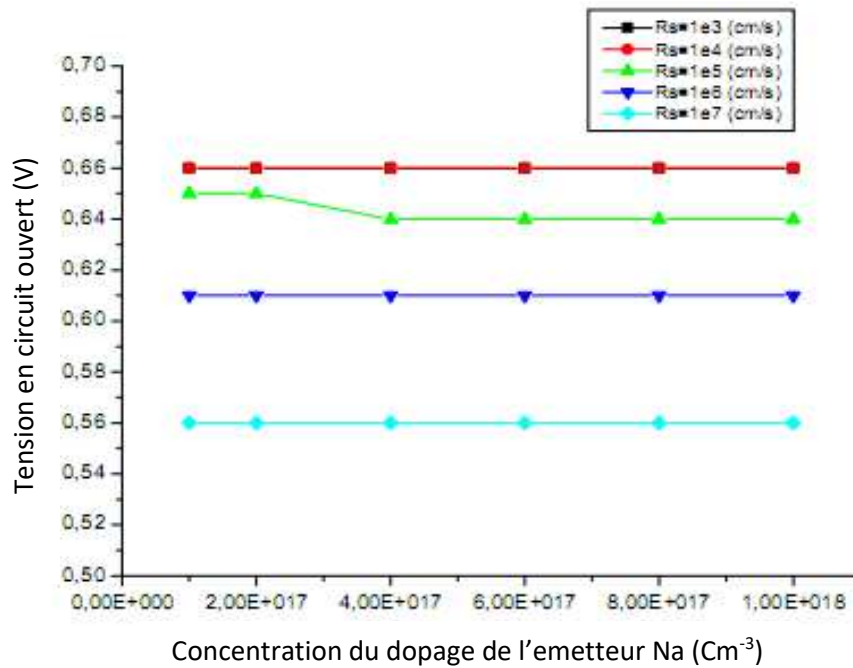


Figure 4.29: Evolution de la tension en circuit ouvert de la cellule en fonction du dopage de l'émetteur pour différentes valeurs de vitesse de recombinaison

Dans cette figure, nous remarquons que la tension en circuit ouvert ne varie pas en fonction du dopage de l'émetteur. Par contre on observe une augmentation remarquable avec la variation de la vitesse de recombinaison superficielle.

4.8.3 Influence de la vitesse de recombinaison superficielle sur le facteur de forme

L'étude de la variation du facteur de forme en fonction du dopage de la couche émettrice pour différentes valeurs de vitesse de recombinaison superficielle, donne les résultats représentés sur la figure 4.30.

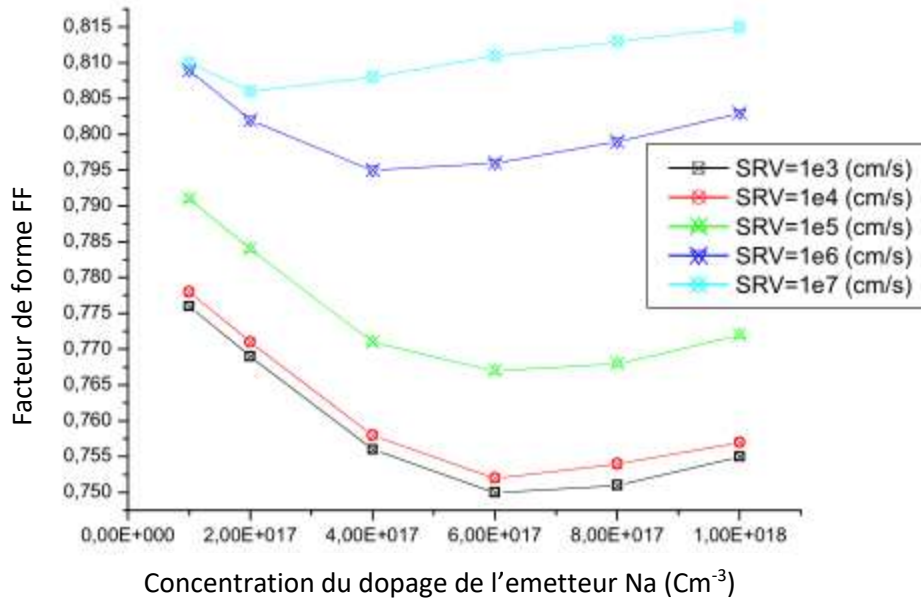


Figure 4.30: Evolution du facteur de forme de la cellule en fonction du dopage de l'émetteur pour différentes valeurs de vitesse de recombinaison superficielle

A partir de cette figure, nous observons que pour des valeurs de concentration de l'émetteur entre 10^{17} à $6 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ il y'a une décroissance du facteur de forme quelque soit la valeur de la vitesse de recombinaison superficielle. Et pour des valeurs de concentration de l'émetteur entre $6 \cdot 10^{17}$ à 10^{18} cm^{-3} une croissance moins rapide du facteur de forme avec l'augmentation du dopage Na.

4.8.4 Influence de la vitesse de recombinaison superficielle sur le rendement

L'étude de la variation du facteur de forme en fonction du dopage de la couche de l'émetteur pour différentes valeurs de vitesse de recombinaison superficielle donne les résultats représentés sur la figure 4.31.

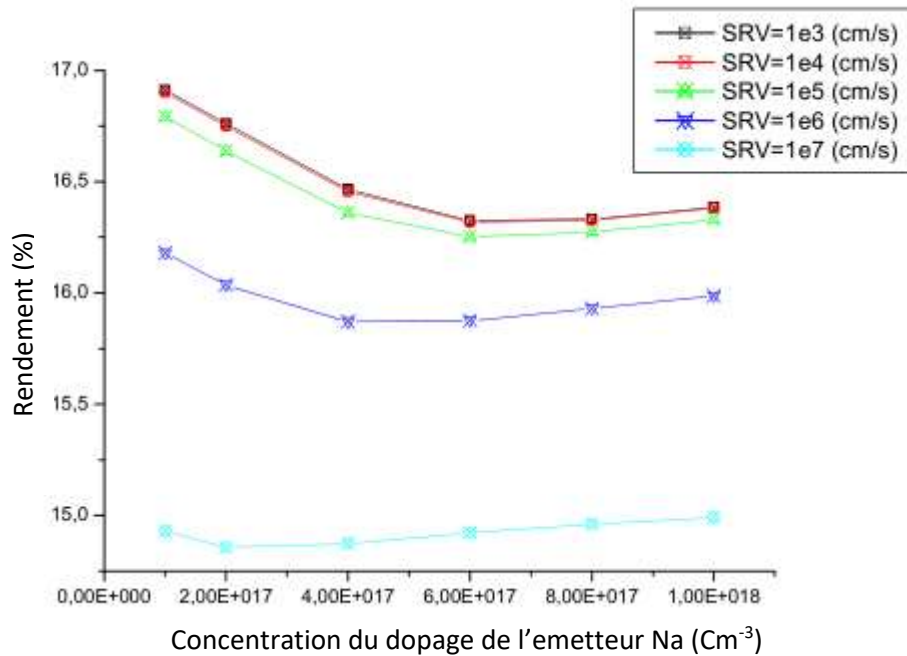


Figure 4.31 : Evolution du rendement de la cellule en fonction du dopage de l'émetteur pour différentes valeurs de vitesse de recombinaison superficielle

Le rendement d'une cellule solaire est relié à la densité du photo-courant, la tension de circuit ouvert et le facteur de forme. Donc les courbes des rendements montrent bien une décroissance des rendements pour des valeurs de concentration de l'émetteur entre 10^{17} à $6 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Après une croissance moins rapide du rendement avec l'augmentation du dopage Na.

4.9 Influence de la température sur les caractéristiques de la cellule solaire SiGe

La température est un paramètre majeur dans la détermination des performances des cellules solaires. Une grande partie de l'énergie incidente (85%) à la surface de la cellule est dissipée sous forme de chaleur [9]. En général, la chaleur est évacuée par convection naturelle de l'air ambiant à la surface des modules. Les propriétés de la cellule solaire sont très sensibles à la variation de la température. Nous voulons ici, examiner l'effet de la température sur les performances des cellules photovoltaïque à base de SiGe.

La figure 4.32 représente l'influence de la température sur les paramètres de performance de la cellule pour des températures allant de 270 à 340 K par pas de 10 K.

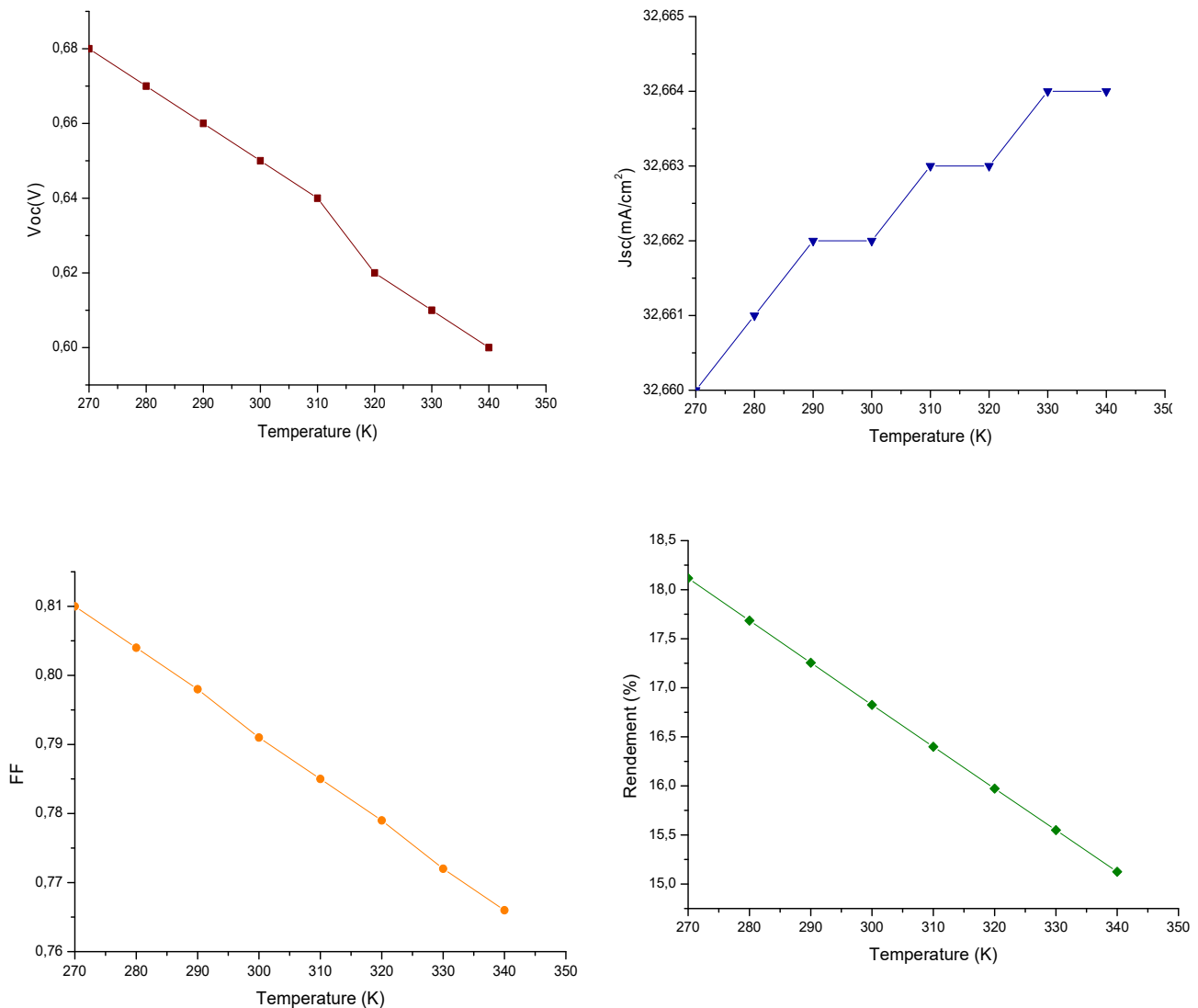


Figure 4.32 : Effet de la température de fonctionnement sur les performances de la cellule SiGe

Comme on peut le voir à la Figure 4.32, les valeurs de V_{oc} , FF et le rendement décroissent fortement avec l'augmentation de la température alors que J_{sc} augmente faiblement avec celle-ci. Lorsque la température augmente, les électrons dans la cellule gagnent plus d'énergie et deviennent par-là plus instables et plus susceptibles à se recombinier avec les trous avant d'atteindre la zone de charge d'espace et être collectés. Ceci contribue à décroître les valeurs de V_{co} et de FF.

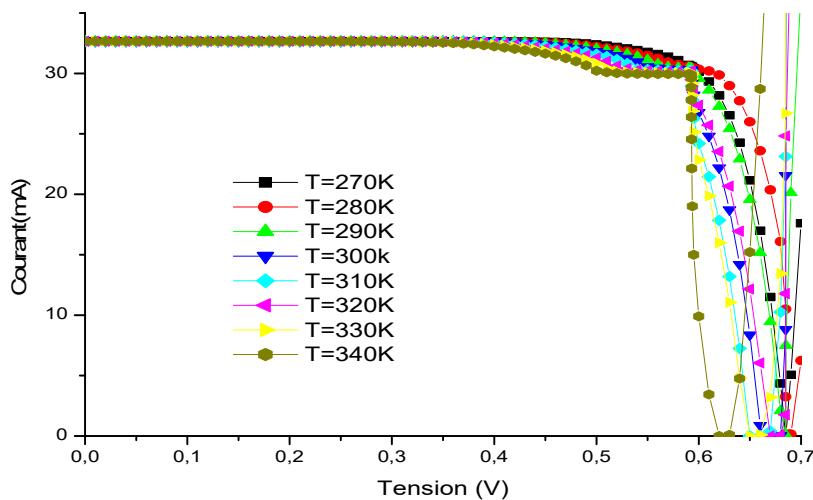


Figure 4.33: variation de la densité de courant $I(V)$ en fonction de la variation de température

La figure 4.33 présente la variation de la densité de courant $I(V)$ pour différentes valeurs de la température T varie de 270 K à 340 K par un pas de 10 K. On remarque que l'augmentation de la température provoque une diminution de la tension de circuit ouvert cette diminution est due à l'effet de la température sur le courant de saturation et aussi l'énergie de la bande interdite diminue donc génération plus de porteurs de charge (électron/trou). Lorsque la température varie de 270 à 340K, la tension de circuit ouvert diminue de 0.68 V à 0.60 V. L'effet de la température sur la densité du courant de court-circuit est négligeable.

4.10 Les performances optimales de la cellule SiGe étudiée

Si nous réunissons les paramètres obtenues auparavant, on aura des performances optimales de la cellule étudiée. Dont les résultats sont représentés dans le tableau suivant :

Tableau. 4.2: Les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire SiGe optimisée.

Paramètres photovoltaïques	V _{co} (V)	J _{sc} (mA/cm ²)	FF	η (%)
	0.65	32.662	0.791	16.826

*

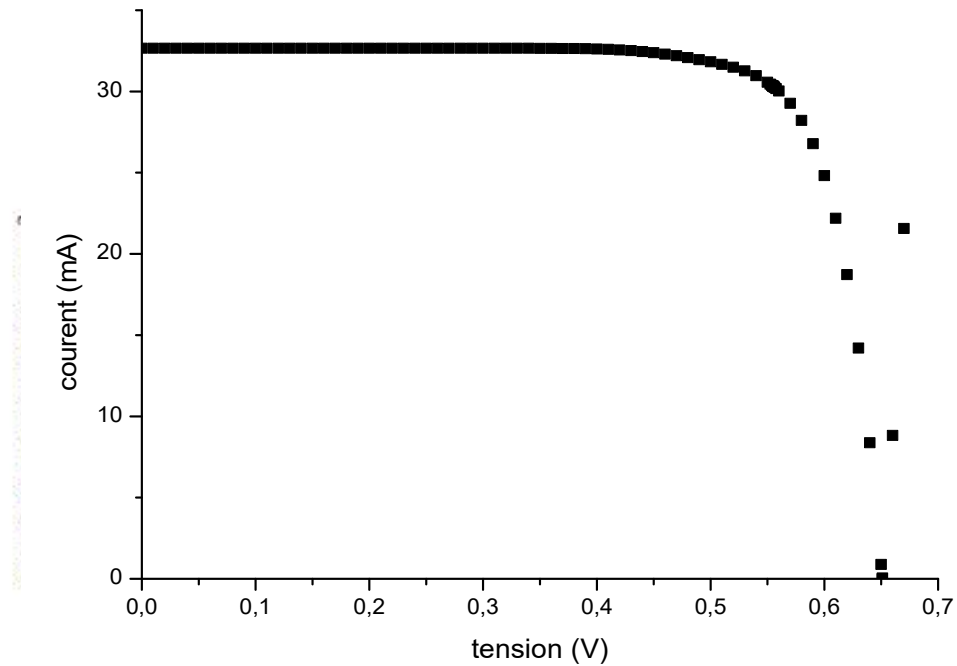


Figure 4.34: Caractéristique J-V de la cellule optimisée SiGe

Partie II: Simulation d'une cellule solaire à base de SiGe avec une couche antireflet en Silicium poreux

4.11 Présentation du silicium poreux

4.11.1 La formation du silicium poreux

Le silicium poreux est obtenu par attaque électrochimique d'un substrat de silicium monocristallin dans une solution à base d'acide fluorhydrique. Le courant électrique est appliqué entre l'anode constituée par le substrat de silicium et la cathode en platine. Les propriétés physiques et structurales de la couche de silicium poreux obtenue, telles que la porosité, la taille et la morphologie des pores, dépendent des paramètres suivants :

- l'orientation cristallographique, le type et la concentration du dopant du silicium monocristallin,
- la concentration d'acide fluorhydrique dans l'électrolyte,
- la densité de courant appliquée,
- la température de la solution et l'éclairement de la cellule.

Quant à l'épaisseur des couches poreuses, elle dépend uniquement du temps d'anodisation. Les conditions de formation du silicium poreux pour un substrat et un électrolyte donnés varient donc en fonction de la densité de courant anodique appliquée. La figure 4.35 montre une courbe caractéristique de la densité du courant appliquée en fonction de la tension (J (V)) [10]

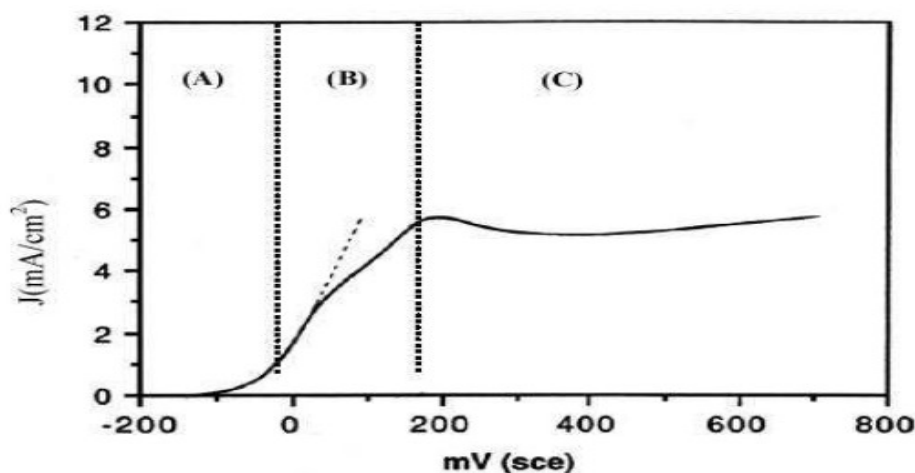


Figure 4.35 : Caractéristique $J(V)$ relative à un échantillon de silicium poreux (P^+) préparé à partir d'une solution de HF à 1% [10]

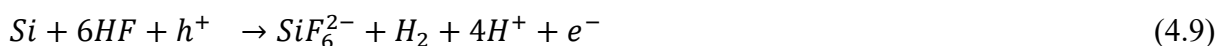
Nous pouvons distinguer trois zones (A, B et C). Aux très faibles tensions, il y a formation d'une couche de silicium poreux mal définie (zone A). Pour des tensions plus grandes, inférieures à une valeur critique, il y a formation d'une couche poreuse (zone B). Le domaine des fortes tensions correspond à la dissolution homogène du silicium conduisant à ce qu'on appelle l'électropolissage (zone C).

4.11.2 Mécanisme de dissolution de Silicium

L'électrochimie de la dissolution du silicium monocristallin reste sujette à interprétation et plusieurs théories ont été avancées. Cependant, c'est celle proposée par Lehmann et Gösele [11] en 1991 qui a reçu le plus grand consensus. La dissolution du silicium n'est possible que si le courant délivre des trous issus du matériau à l'interface : C'est la réaction d'anodisation.

En effet, La surface de Si immergée dans l'acide fluorhydrique est initialement bien passivée avec de l'hydrogène. Les liaisons Si-H sont légèrement polarisées. Un apport de trous sur la surface détruit ces liaisons Si-H et favorise la formation de liaisons Si-F. Cette liaison polarise à son tour la liaison Si-H adjacente et permet la création d'une seconde liaison Si-F avec libération de dihydrogène H₂ et d'un électron. Comme les liaisons Si – F sont plus fortement polarisées que les liaisons Si – Si une molécule SiF₄ se libère sous l'attaque du complexe par HF ou H₂O. La surface résultante est ensuite passivée de nouveau par des atomes d'hydrogène (Figure 4.36).

La réaction nette de la dissolution du silicium est donnée dans l'équation: (Rauscher et Spohn, 2001[12]), où h⁺ et e⁻ représentent respectivement électron et trou :



Le dégagement de gaz d'hydrogène résultant de cette réaction peut être observé à partir de la surface du silicium pendant le processus de la dissolution. Il est évident à partir de la réaction que les atomes de silicium sont éliminés à partir de la surface générer une structure poreuse contenant des nanocristallites de silicium.

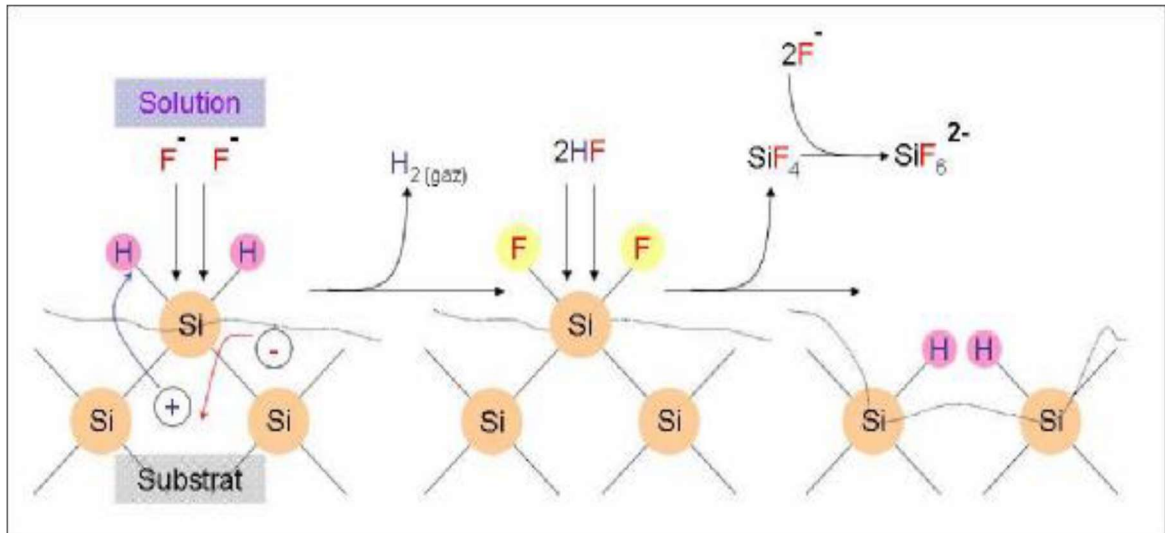


Figure 4.36 : Illustration du mécanisme de dissolution de p-type Si dans l'acide fluorhydrique [11].

Une lacune de la dimension d'un atome de Si est donc créée à la surface du substrat. La modification de surface va changer la répartition du champ électrique local de telle façon que le transfert de trous aura lieu préférentiellement sur la zone déjà attaquée. Les trous migrent préférentiellement au niveau des inhomogénéités et ainsi amorcent la formation des pores en favorisant une gravure localisée à ces zones.

4.12 Caractéristiques du silicium poreux

Les caractéristiques morphologiques du silicium poreux telles que la porosité, la taille des pores et des cristallites ou encore l'épaisseur de la couche poreuse, sont contrôlées par les paramètres d'anodisation. La nature du substrat (type, niveau de dopage, orientation cristalline), la densité de courant, la composition de l'électrolyte ou encore l'illumination sont les principaux paramètres qui influencent la gravure électrochimique du silicium.

4.12.1 Porosité

La porosité p est définie comme étant le pourcentage de vide dans le volume de silicium poreux.

$$p = \frac{\rho_{Si} - \rho_{SiP}}{\rho_{Si}} \quad (4.10)$$

ρ_{Si} : densité du silicium

ρ_{SiP} : densité du silicium poreux

Elle peut varier de 15 à 95%. Elle est déterminée par gravimétrie en utilisant la formule suivante :

$$p = \frac{m_1 - m_2}{m_1 - m_3} \quad (4.11)$$

m_1 : masse de l'échantillon avant anodisation.

m_2 : masse de l'échantillon après anodisation.

m_3 : masse de l'échantillon après dissolution totale de la couche poreuse dans la soude.

La porosité est une caractéristique importante du silicium poreux mais elle ne donne aucune information sur les propriétés microscopiques telles que la taille ou la forme des pores: deux échantillons ayant la même porosité peuvent avoir des morphologies ou des géométries complètement différentes [13]

4.12.2 Surface spécifique

La surface spécifique est l'une des propriétés les plus importantes du silicium poreux. Elle est définie comme étant le rapport entre la surface développée et le volume de la couche poreuse. Du fait de sa nature poreuse, la couche présente une surface spécifique importante. Elle est mesurée par adsorption de gaz. Elle diminue quand la porosité augmente et elle peut passer de 900 m²/cm³ pour une porosité de 50% à environ 100 m²/cm³ pour une porosité de 95%. [14].

4.12.3 Epaisseur

Les couches poreuses peuvent être obtenues avec des épaisseurs allant de quelques nanomètres à plusieurs microns. L'épaisseur de la couche poreuse peut être déterminée soit par observation de l'échantillon en coupe par microscopie électronique à balayage, soit par pesée de l'échantillon et en utilisant la formule suivante :

$$d = \frac{m_1 - m_3}{\rho_{Si}} \quad (4.12)$$

d : L'épaisseur de la couche poreuse

ρ_{Si} : La densité du silicium

A : L'aire de la surface porosifiée

m_1 : La masse de l'échantillon avant anodisation

m_3 : La masse de l'échantillon après dissolution totale de la couche poreuse dans la soude [15]

4.12.4 Morphologie

La taille et la morphologie des pores sont essentiellement liées au dopage du substrat de départ. Trois catégories de silicium poreux sont habituellement distinguées selon la résistivité comme l'illustre la figure 4.37 [16] ; il s'agit du

- Silicium poreux de type P : la valeur de la résistivité ρ est supérieure ou égale à $1 \Omega \cdot \text{cm}$, la structure est de type éponge; elle est homogène et isotrope, les pores assimilables à des ellipsoïdes de taille nanométrique sont fortement interconnectés (nanoporeux) (figure 4.37c).
- Silicium poreux de type P+ ou N+ : la taille des pores dépend de la valeur de la résistivité ρ du substrat. La structure est de forme colonnaire et anisotrope, les pores quasi-cylindriques d'une taille de quelques dizaines de nanomètres possèdent de nombreux ramifications latéraux (mésoporeux) (figure 4.37 a et b)
- Silicium poreux de type N: la résistivité est de l'ordre de $1 \Omega \cdot \text{cm}$, la formation de la couche nécessite un apport de trous sous éclaircissement. A faible épaisseur, la structure est similaire à celle obtenue sur du silicium de type P (figure 4.37 d) ; mais les dimensions des pores et des cristallites de silicium sont de l'ordre du micromètre (macroporeux).

Donc, selon la taille des pores, le silicium poreux est classé en 3 catégories regroupées dans le tableau 4.3 [17]

Tableau 4.3: Les différentes classes du silicium poreux selon la taille des pores [17]

Type de substrat	Morphologie de la couche poreuse	Nature du silicium poreux	Diamètres des pores (nm)
P	Homogène et isotrope	Nanoporeux	< 2
P+, N+	Structure colonnaire	Mésoporeux	2 - 50
N (sous éclaircissement)	Structure spongieuse	Macroporeux	> 50

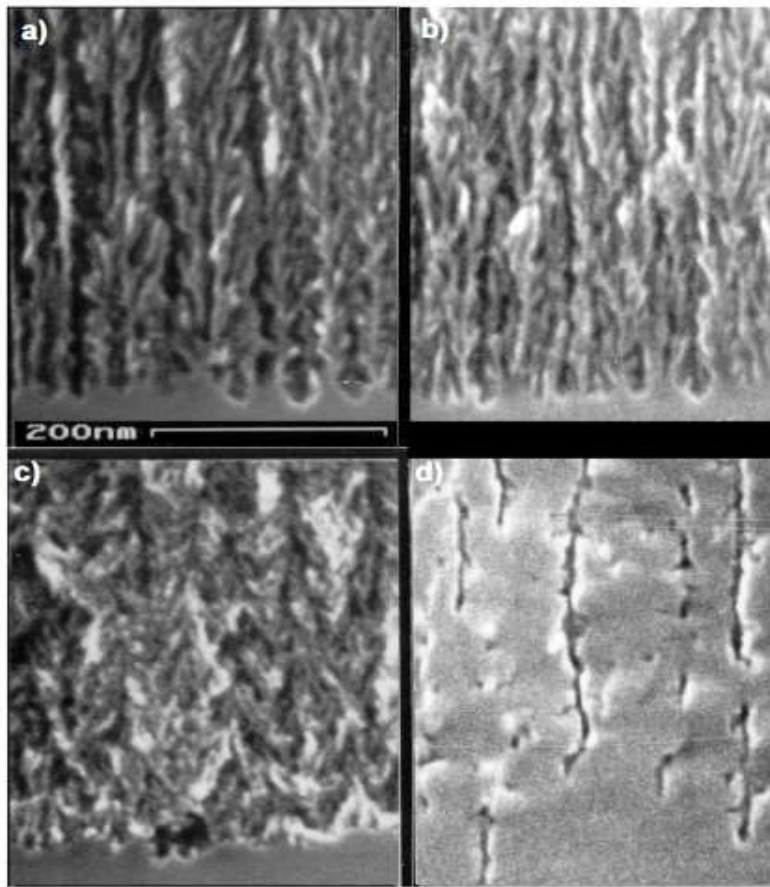


Figure 4.37 : Micrographies sur la tranche obtenues par MEB de couches de silicium poreux montrant la différence de morphologie selon le type et la concentration de dopants ; type P+ (a), type N+ (b), type P (c), type N (d) [16]

4.13 Propriétés optiques du silicium poreux

Le silicium poreux possède des propriétés optiques intéressantes, très fortement liées à sa nature poreuse. Nous présentons dans cette partie les différentes propriétés optiques comme la luminescence à des longueurs d'onde variables qui vont du bleu au proche Infrarouge (PIR) [18], l'indice de réfraction et le coefficient d'absorption.

4.13.1 Propriétés de luminescence

La découverte de la forte luminescence du silicium poreux à température ambiante a suscité beaucoup d'intérêt pour ce matériau, surtout que, le silicium cristallin possède une faible efficacité optique. La photoluminescence (PL) a été surtout étudiée dans le domaine du visible sur des couches de silicium poreux formées sur des substrats de type P.

Toutefois, la PL observée pour le silicium poreux élaboré sur des substrats de type P⁺ est faible. En revanche, la luminescence du silicium poreux diminue dans le visible, et ce, après oxydation partielle de ses couches, ceci est attribué essentiellement à la réduction des tailles des cristallites. Par contre, après une oxydation totale, la luminescence disparaît complètement dans le visible pour apparaître dans le domaine du proche Infrarouge.

La PL bleue a été observée la première fois sur des échantillons vieillis (type P) [19, 20]. Cette luminescence n'est observée que pour des couches conservées à l'air, ou après une oxydation thermique [21]. Les auteurs expliquent cette PL par la présence d'oxyde à la surface du silicium poreux [22]. Cette luminescence est peu intense et a une durée de vie très courte de l'ordre de la nanoseconde. De plus, elle est caractérisée par une bande de largeur à mi-hauteur très importante et la position moyenne en énergie est autour de 2.4 eV [23].

4.13.2 L'indice de réfraction du silicium poreux

Le silicium poreux peut être décrit comme un milieu composite (air-silicium), dont l'indice varie sur un grand intervalle entre celui du silicium et celui de l'air. L'indice de réfraction du silicium poreux varie avec la porosité, il diminue lorsque la porosité augmente, comme le montre la figure 4.38. Cependant, il s'avère difficile de calculer avec précision l'indice d'une couche poreuse connaissant sa porosité. Pour cela, plusieurs modèles ont été élaborés (Bruggeman, Looyenga, . . .) pour décrire ce matériau [24, 25]. L'indice de réfraction du silicium poreux diminue après oxydation, cependant, si la couche poreuse est partiellement oxydée, l'indice va dépendre de la fraction volumique de silicium transformé en silice [26]

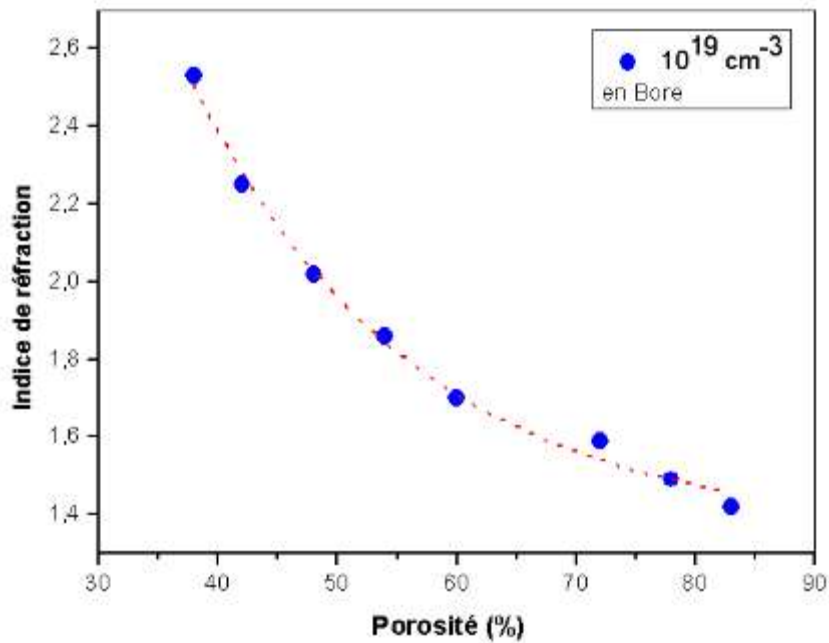


Figure 4.38: variation de l'indice de réfraction en fonction de la porosité pour un substrat de silicium dopé avec 10^{19}cm^{-3} de bore [27]

4.13.3 Le coefficient d'absorption du silicium poreux

L'analyse des spectres d'absorption du silicium poreux permet d'expliquer l'origine physique de la luminescence du silicium poreux dans le visible. Généralement, le confinement quantique est considéré comme responsable de la luminescence. Différentes études du coefficient d'absorption [28] ont été menées par des mesures de transmission ou de photoconductivité.

Sur la figure 4.39, nous constatons une forte diminution du coefficient d'absorption des échantillons réalisés sur des substrats de type P dans le domaine des basses énergies. Cette diminution est attribuée à un effet de confinement quantique remarquable sur les échantillons de type P qui sont constitués de cristallites de silicium de faibles dimensions [29]. Cette interprétation est en accord avec le modèle qui décrit l'absorption de l'ensemble des cristallites dont la densité d'états électroniques est modifiée par le confinement quantique [30]. Comme les échantillons de type P ont une luminescence beaucoup plus importante que les échantillons de type P+, l'ensemble des résultats confirme le rôle du confinement quantique dans la luminescence du silicium poreux. Après oxydation, le coefficient d'absorption diminue fortement dans le visible et est même négligeable dans l'Infra-Rouge [31].

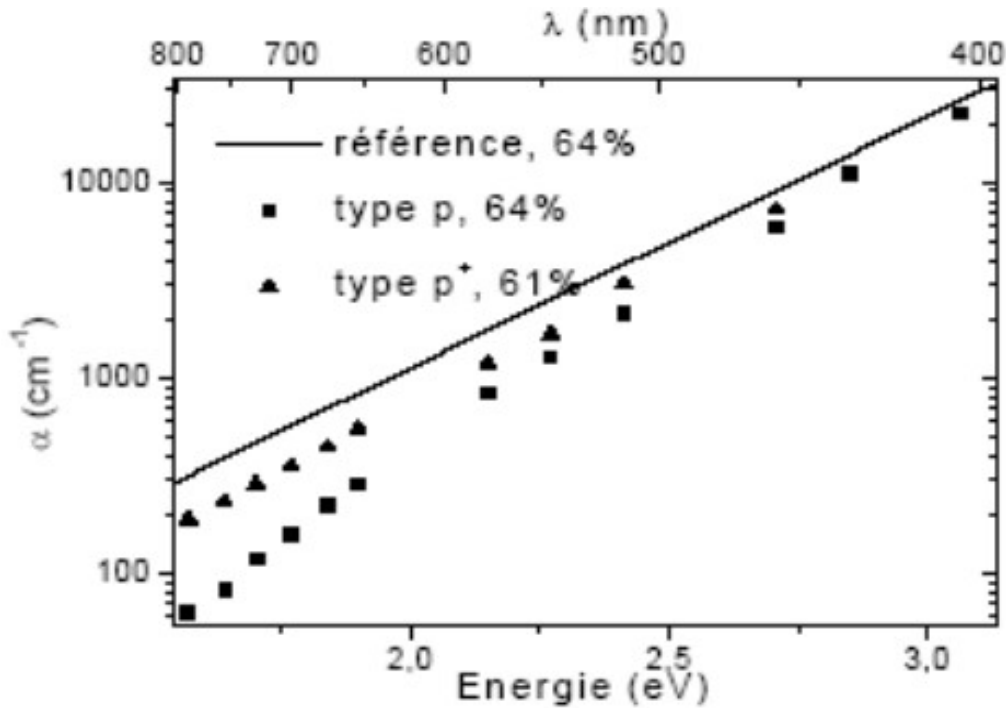


Figure 4.39 : Spectres d'absorption d'échantillons de silicium poreux de porosités voisines réalisés à partir de substrats de types P et P+, comparés à celui du silicium massif (en trait plein) [30]

4.14 Modélisation du Silicium poreux selon l'approximation du milieu effectif de Bruggeman

4.14.1 Approximation des milieux effectifs de Bruggeman (BEMA)

Pour modéliser optiquement une couche, il suffit de connaître son indice et son épaisseur, il existe des ouvrages de références dans lequel sont répertoriés les indices d'un grand nombre de matériaux. Cependant, les données fournies correspondent à des matériaux homogènes pris comme référence [32]. Si le milieu étudié est un mélange de plusieurs matériaux ou si, à cause de la méthode de dépôt, sa densité est différente de celle du matériau de référence, il est possible de calculer son indice à partir de l'approximation du milieu effectif (EMA: Effectif Médium Approximation) [33, 34, 35]. Il existe en outre plusieurs méthodes d'approximation des milieux effectifs, nous citons en particulier : la Méthode de Bruggeman, la méthode de Cauchy et la méthode de Looyenga [36].

Parmi les modélisations des indices optiques, la plus utilisée est celle du milieu effectif de Bruggeman.

La relation de Bruggeman pour un milieu m recevant des particules sphériques des différents matériaux a et b etc., décrit le comportement diélectrique du milieu effectif.

Le mélange doit être de nature physique (pas de relation chimique entre les phases) et homogène et que chacune des phases a et b ait la même constante diélectrique dans le milieu effectif que celle qu'il a dans un milieu uniforme. Dans ces conditions et pour un mélange de deux constituants, la fonction diélectrique du mélange est donnée par l'expression :

$$f_a \frac{\varepsilon_a - \varepsilon_m}{\varepsilon_a + 2\varepsilon_m} - f_b \frac{\varepsilon_b - \varepsilon_m}{\varepsilon_b + 2\varepsilon_m} = 0 \quad (4.13)$$

ε_a et ε_b sont les fonctions diélectriques des composés a et b .

f_a et f_b la fraction en volume de la phase a ou b , dans le milieu effectif on a $f_a + f_b = 1$

L'indice du milieu effectif est contrôlé par les indices des différentes phases qui apportent leur contribution à l'indice effectif selon leur fraction en volume.

Le modèle le plus simple est un système isotropique à deux composants. On peut considérer le silicium poreux (SiP) comme un milieu à deux composantes : Silicium massif et pores (vide), avec des dimensions inférieures à la longueur d'onde λ .

Dans ce cas, le SiP peut être traité comme un milieu optiquement isotropique d'indice de réfraction n , avec :

$$n_{air} < n < n_{Si}$$

L'équation de Bruggeman pour un système à deux composants ressemble à :

$$f \frac{n_{Si}^2 - n^2}{n_{Si}^2 + 2n^2} + p \frac{1 - n^2}{1 + 2n^2} = 0 \quad (4.14)$$

Où

n : est l'indice de réfraction effectif de SiP.

p : est la fraction volumique des pores.

$f = 1 - p$: est la fraction volumique de silicium dans la couche poreuse.

4.15 Etude de l'influence d'une couche Antireflet en Silicium Poreux sur les performances de la cellule solaire à base de SiGe

4.15.1 Structure étudié

Dans cette deuxième partie de simulation, nous allons utiliser la même structure que la précédente, mais en ajoutant une couche antireflet en silicium poreux sur la coté avant de la structure, et cela se fait à l'aide de logiciel SILVACO-ATLAS (Figure 4.40).

Lors de cette étude, les échantillons du Silicium poreux ont été réalisés à partir de substrats de silicium monocristallin de type P+ dopé avec des atomes de Bore, d'orientation cristalline (100) et de résistivité comprise entre 4–6 mΩ.cm à température ambiante T=300K [37].

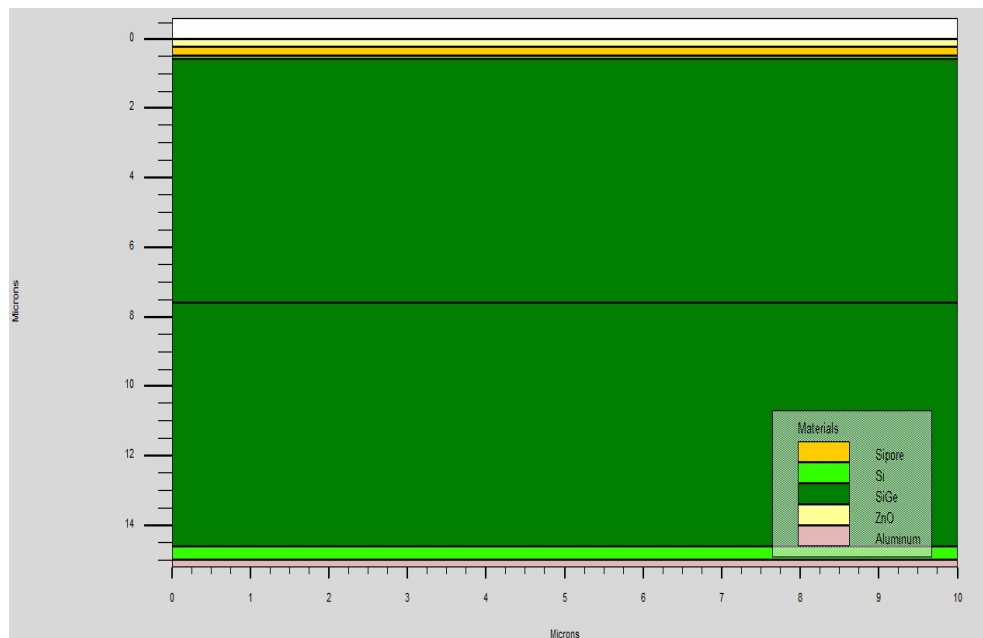


Figure 4.40 : Structure de la cellule simulée sous SILVACO –Atlas

4.15.2 Détermination des indices optiques du Silicium Poreux (SiP)

Les courbes tracées sur les Figures 4.41 et 4.42 montrent respectivement le domaine de variation de l'indice de réfraction et de l'indice d'extinction du silicium poreux dans l'intervalle de longueur d'onde de 300 -1200 nm. Ces indices sont calculés par l'EMA de Bruggeman.

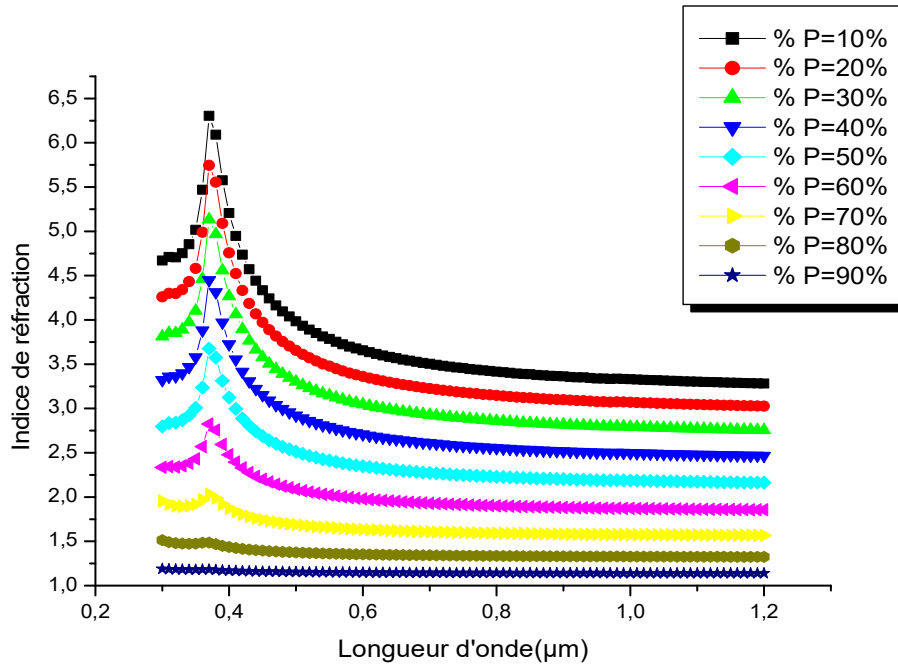


Figure 4.41 : Indices de réfraction du silicium poreux calculés par l'EMA de Bruggeman.

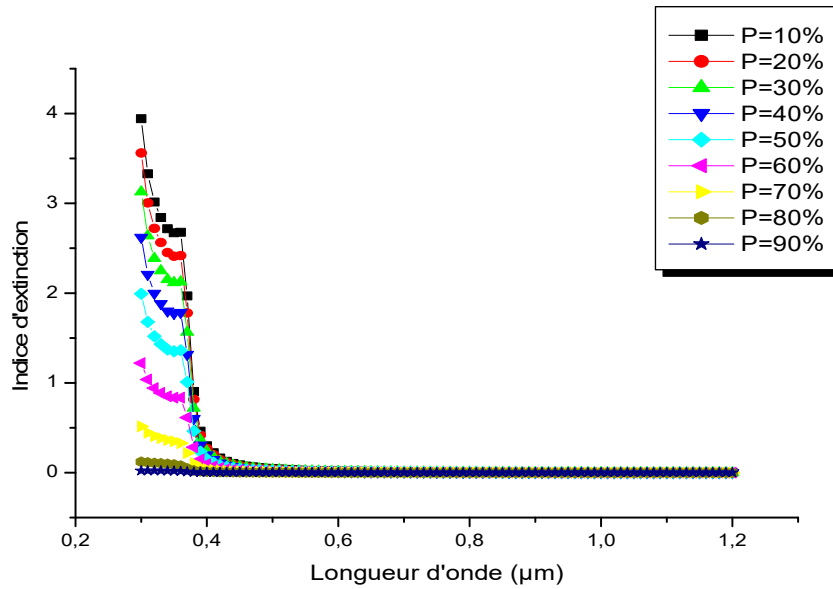


Figure 4.42 : Indices d'extinction du silicium poreux calculés par l'EMA de Bruggeman.

Quand la porosité augmente, la permittivité diélectrique effective diminue ainsi que l'indice de réfraction, tandis que le gap augmente, car la couche absorbe moins de photons, ce qui influence négativement sur le taux de génération de paires électrons- trous.

4.15.3 Paramètres Caractéristiques de la Cellule Utilisée

Energie de gap :

L'énergie de gap peut être déterminée à partir de la relation bien connue [38] :

$$\alpha h\gamma = A(h\gamma - E_g)^m \quad (4.13)$$

Où :

α : est le coefficient d'absorption du Silicium poreux.

$h\gamma$: est l'énergie du photon.

E_g : est l'énergie de gap du matériau

m : représente le type de transition. Pour transition directe ($m = 1/2$) et pour transition indirecte ($m = 2$).

A : est une constante représente la qualité du film [38]

En utilisant les valeurs de l'indice d'extinction k trouvées pour différentes porosité, on a calculé le coefficient d'absorption α à l'aide de la relation :

$$\alpha = 4\pi k/\lambda$$

Où λ est la longueur d'onde.

En représentant les courbes des variations de $(\alpha h\nu)^2$, en fonction de l'énergie (Figure 4.43), on peut estimer l'énergie du gap E_g par l'extrapolation de la partie linéaire des courbes à l'ordonnée nulle.

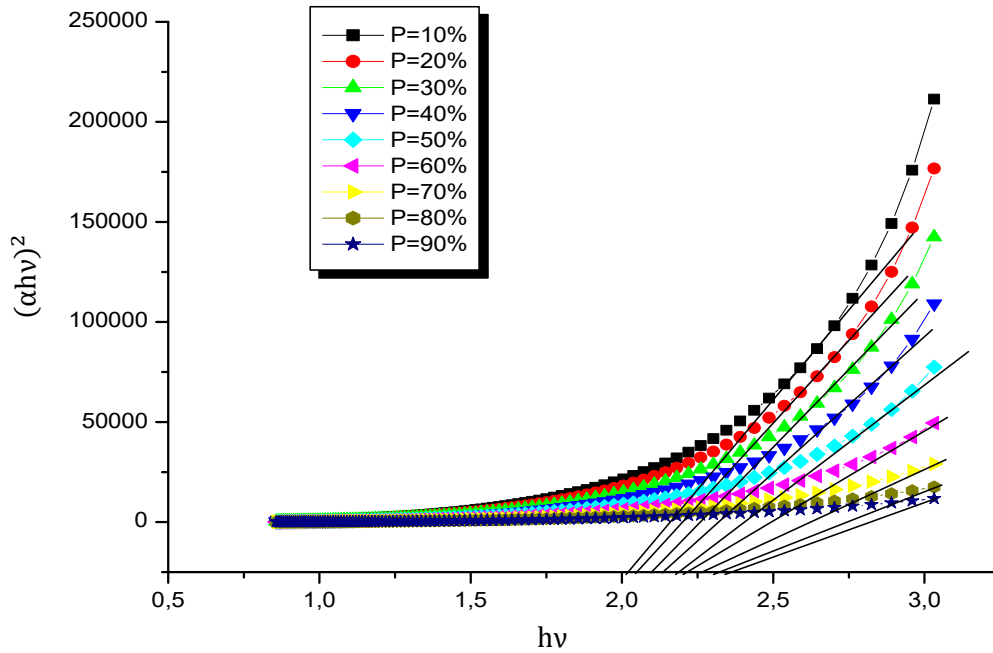


Figure 4.43 : $(\alpha hv)^2$ en fonction de l'énergie de l'onde électromagnétique incidente ($E = h\nu$) avec l'extrapolation de la partie linéaire de ces courbes

L'équation de NM.RAVINDRA et al utilisée pour calculer l'indice de réfraction est représentée par l'expression [39] :

$$n_{SiP} = a + bE_g$$

Où :

$$a = 4,048 \text{ et } b = -0,62 \text{ eV}^{-1} \text{ et sachant que : } \epsilon_r = n_{SiP}^2.$$

Les valeurs de l'énergie de gap (E_g) et la constante diélectrique (ϵ_r) du silicium poreux pour différentes porosités sont reportées dans le tableau 4.4.

Tableau 4.4: L'énergie de gap du Silicium poreux pour différentes porosité

P (%)	Eg (ev)	ϵ_r
10	2,023	7.80498319
20	2,053	7.70140202
30	2,105	7.52350041
40	2,144	7.39143844
50	2,186	7.25052558
60	2,219	7.14075973
70	2,278	6.94659821
80	2,34	6.74544784
90	2,385	6.60130249

Quand la porosité augmente, la permittivité diélectrique effective diminue ainsi que l'indice de réfraction, tandis que le gap augmente, car la couche absorbe moins de photons, ce qui influ négativement sur le taux de génération de paires électrons- trous. Un gap de 2.385 eV paraît être adéquat pour avoir une porosité optimale de (90%).

Les paramètres essentiels utilisés dans la simulation pour la cellule solaire à base de SiGe avec une couche antireflet en Silicium poreux de porosité (P=90%) sont illustrées dans le tableau 4.5.

Tableau 4.5 : Paramètres du SiGe et du Silicium Poreux (SiP) introduits utilisés dans la simulation

Propriétés	SiP (CAR)	P+ Si	P SiGe	n SiGe	n+Si
Bande interdite, (eV)	2.385	1.12	0,96	0,96	1.12
Température (K)	300	300	300	300	300
Constant diélectrique, ϵ_r	6.601	11.9	12,93	12,93	11.9
Mobilité des électrons (cm²/Vs)	1 E 7	1350	2110	2110	1350
Mobilité des trous (cm²/Vs)	1 E 7	450	312	812	450
Densité effective, Nc (cm⁻³)	1 E 16	2.8E19	2,5 E 20	2,5 E 20	2.8E19
Densité effective, Nv (cm⁻³)	1 E 16	1.04 E19	2,5 E 20	2,5 E 20	1.04 E19
Affinité électronique, χ (eV)	4,09	4.05	3,92	3,92	4.05

4.15.4 Effet de la porosité de silicium poreux sur les performances de la cellule

Les figures (4.44.a, b, c et d) illustrent respectivement les variations de la densité de courant de court circuit, la tension de circuit ouvert, le facteur de forme et le rendement de conversion fournie par la cellule solaire à base de SiGe pour différentes porosité de la couche antireflet (SiP).

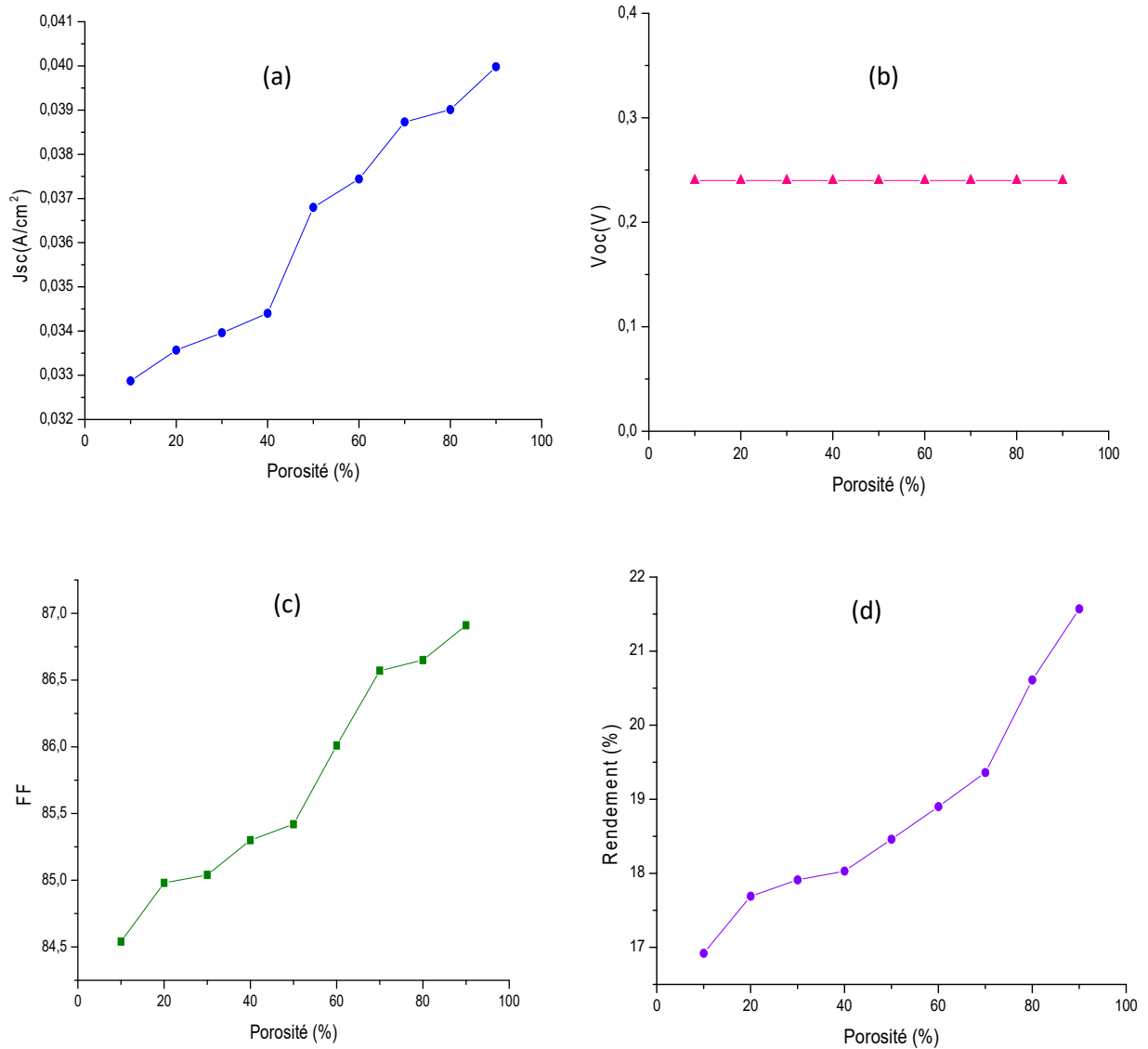


Figure 4.44 : Variation des paramètres photovoltaïques de la cellule en fonction de porosité de SiP.

D'après ces courbes, nous pouvons remarquer une amélioration du rendement de conversion de la cellule par l'augmentation de la porosité de la couche antireflet (Silicium poreux). Cette amélioration du rendement est dû principalement à l'augmentation de la densité du courant de court circuit J_{sc} , avec une faible contribution de la tension de circuit ouvert V_{co} et du facteur de forme. On peut dire qu'on a obtenu un plus grand courant avec cette couche antireflet, dû à une plus grande absorption de lumière donc une plus grande absorption de photons. En conclusion, la couche antireflet en silicium poreux nous permettra une augmentation significative du rendement à 21.57% pour une porosité $p=90\%$.

4.16 Les performances optimales de la cellule étudiée

Si nous réunissons les paramètres obtenues auparavant, on aura des performances optimales de la cellule étudiée. Dont les résultats sont représentés dans le tableau suivant :

Tableau 4.6: Les paramètres photovoltaïques de cellule solaire optimisée.

Paramètres photovoltaïques	Vco(V)	Jsc(mA/cm ²)	FF	η (%)
	1.24	39.98	0.6891	21.57

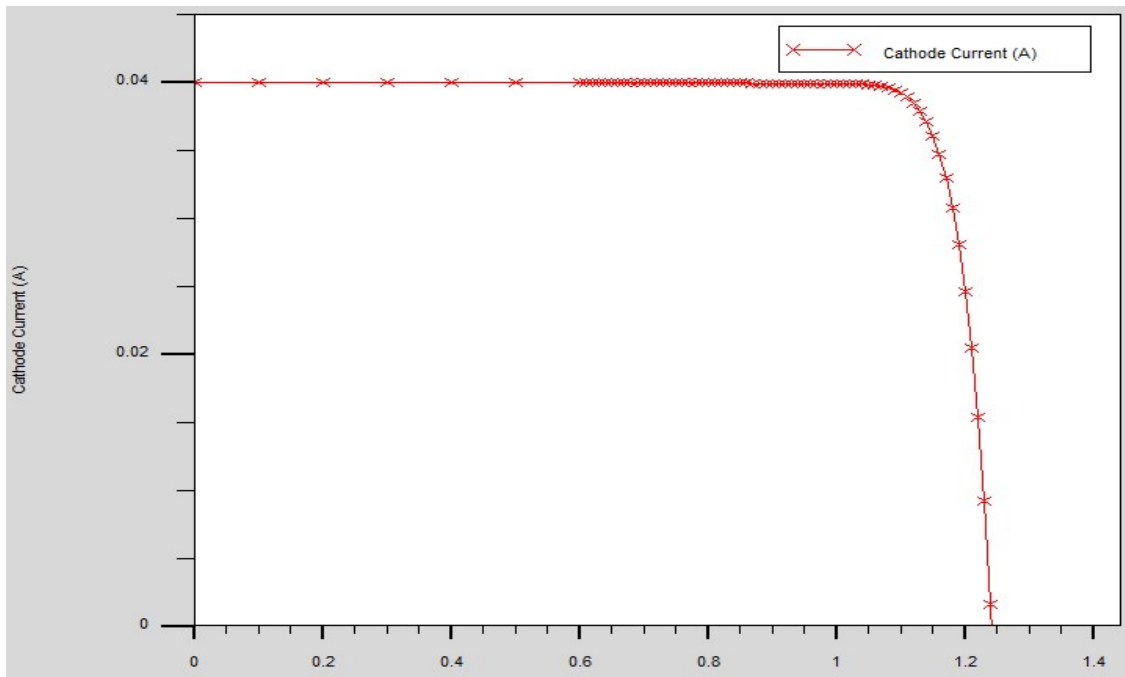


Figure 4.45: Caractéristique I-V de la cellule optimisée sous SILVACO-ATLAS

4.17 Comparaisons des résultats obtenus:

Le tableau suivant donne une comparaison entre les performances photovoltaïques obtenus par notre simulation de la cellule solaire à base de SiGe et la même cellule avec une couche antireflet en silicium poreux (P=90%).

Tableau 4.7: Comparaisons des résultats.

Paramètres photovoltaïques	Vco(V)	Jsc(mA/cm ²)	FF	η (%)
Cellule sans CAR	0.65	32.662	0.791	16.826
Cellule avec CAR	1.24	39.98	0.6891	21.57

Après lecture des résultats récapitulés dans le tableau ci-dessus, on remarque que l'adjonction de Silicium poreux comme couche antireflet dans une cellule solaire à base de SiGe a amélioré le rendement de plus de 5% en augmentant le courant de court-circuit de 7.318 mA/cm² et la tension à circuit ouvert Vco de 50 mV par rapport à une cellule solaire sans couche antireflet. Ces résultats expliquent le rôle que joue la couche antireflet sur le rendement de la cellule en minimisant de plus en plus la réflexion du flux incident afin de laisser passer la totalité de ce flux vers la couche active.

4.18 Conclusion:

Dans la première partie de ce chapitre, nous avons utilisé le logiciel AMPS 1D pour l'étude du comportement électrique de notre cellule solaire à base de SiGe. Nous avons essayé de trouver les meilleurs paramètres technologiques (épaisseur, dopage) de chaque région de la cellule donnant les meilleures caractéristiques photovoltaïques, ainsi que l'influence de la vitesse de recombinaison superficielle. Cette étude a montré l'influence de ces paramètres sur le rendement de la cellule et nous a éclairés sur l'ordre de grandeur à choisir pour ces régions. Nous avons obtenu un rendement de conversion de 16,826%

Enfin, nous avons étudié l'effet de la température sur les caractéristiques de la cellule solaire SiGe optimisée dans l'intervalle de température 270-340K. A partir des résultats de simulation, nous avons constaté une petite augmentation de la densité du courant de court-circuit, et une diminution linéairement des caractéristiques photovoltaïques (la tension en circuit ouvert, le rendement et le facteur de forme) avec l'augmentation de la température.

Dans la deuxième partie de ce chapitre, la simulation à l'aide du logiciel SILVACO-ATLAS des cellules solaires à base de SiGe avec une couche antireflet en silicium poreux, nous a permis de définir l'influence des paramètres du Silicium poreux sur les caractéristiques photovoltaïques de ces cellules solaires. Les résultats obtenus montrent que ces cellules solaires peuvent avoir un rendement de conversion photovoltaïque de l'ordre de 21.57%. Les simulations ont montré que ce rendement optimum est atteint lorsque la porosité de silicium poreux est 90%.

Références chapitre 4 :

- [1] S. Khelifi et A. Belghachi, « Le Rôle de la Couche Fenêtre dans les Performances d'une Cellule Solaire GaAs », Rev. Energ. Ren. Vol.7 (2004)13-21
- [2] S.Chatterjee and L.K. Bera, « Determination of band discontinuities in silicon heterostructures », IETE Journal of Research.vol.53, no.3, pp.199-214, 2007.
- [3] D.V. Lang, R .People, J. C. Bean, and A.M Sergent, « Measurement of the band gap of $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ strained-Layer heterostructures », Applied physics Letters, vol.47, no.12, pp.1333-1335, 1985.
- [4] J. Casado and M. Ruiz, « Calculation of properties derived from near-edge band structure in $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ alloy system », in Proceedings of the 13th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition PVSEC 95, pp.1311-1314, Niza, France, 1995.
- [5] S. Chatterjee, S.Singh and H.Pal, « Effect of Multijonction Approach on Electrical Measurements of silicon and Germanium Alloy Based Thin-Film Solar Cell using AMPS-1D ». International Journal of photoenergy. Volume 2014, Article ID 653206, 6 pages.
- [6] A. Kumar Singh, j. Tiwari, A Yadav and R. Kumar Jha, « Matlab User Interface for Simulation of Silicon Germanium solar Cell ». Journal of Materials. Volume 2015, Article ID 840718, 6 pages.
- [7] B. Dennai, M. Boukais, H. Khachab, A. Ould- abbas « Study the effect of surface recombination velocity on performance of solar cells based SiGe » 4th International Conference on Automation, Control Engineering and Computer Science (ACECS - 2017) Proceedings of Engineering and Technology – PET Vol.19, pp.78-81
- [8] M. Boukais, B. Dennai, A. Ould-Abbas « Optimizing the Emitter Layer for Higher Efficiency Solar Cell Based SiGe Using AMPS1D » Journal of Nano-And Electronic Physics. Vol. 7 No 3, 03015 (4pp) (2015).
- [9] K. Agroui « Etude du Comportement Thermique de Modules Photovoltaïques de Technologie Monoverre et Biverre au Silicium Cristallin » Rev. Energ. Ren.: Valorisation (1999) 7-11
- [10] G. Zhang, S. D. Collins, R. L. Smith, Journal of Electrochemical Society 136 (5), 1561 (1989).
- [11] Lehman V.; Gösele U. Appl. Phys. Lett., 1991. 58, p. 856.
- [12] Rauscher, M., Spohn, H. Physical Review E, 2001, 64: p. 031604
- [13] Pascual A.J., Fern F., Sanchez Andez. C.R. Journal of Porous Materials, 2002 9, p. 57.

- [14] A. Halimaoui, « Porous Silicon Science and Technology », Edité par J.C.Vial et J.Derrien (Springer, Berlin, 1995) p 33.
- [15] O'Halloran G.M., Kuhl M., Trimp P.J., French P.J. Sensors and Actuators A, 1997, 61, p. 415.
- [16] R. L. Smith and S. D. Collins. « Porous Silicon formation mechanisms ». J. Appl. Phys., vol. 71(8): page R1, (1992).
- [17] A. G. Cullis, L. T. Canham, and P. D. J. Calcott. « The structural and luminescence properties of porous silicon ». J. Appl. Phys., vol. 82(3) :page 909, (1997).
- [18] A. J. Kontkiewicz, J. Siejka, S. Seu, G. Nowak, A.M. Hoff, P. Saktival, K.Ahmed, P.Mukherju, S.Witanachi, and J.Lagouski. Appl. Phys. Lett., vol. 65:page 6535, (1994)
- [19] J.F. Harvey, H Shen, R.A Lux, M. Dutta, J. Pamulapati, R. Tsu. Mater Res Soc Proc, 265 (1992) 175.
- [20] D. T. Jiany, I. Corclthard, T.K. Sham, J. W. Lorimer, S. P. Frigo, X. Hfeng, R. H. Rosemberg. « Observations on the surface and bulk luminescence of porous silicon ». Journal Applied Physics, 74 (1993) 6335.
- [21] L. Tsybskov, J.V. Vandyshev, P.M. Fauchet. « Blue emission in porous silicon: Oxygenrelated photoluminescence ». Phys Rev B49 (1994) 7821-7824.
- [22] L.T. Canham « Silicon quantum wire array fabrication by electromechanical and chemical dissolution of wafers », Applied Physics Letters, 57 (1990) 1046-1048.
- [23] S. Gouder « Nanostructures SiGe: Applications en microélectronique » Thèse doctorat, Université de Batna 2 (2014).
- [24] D. E. Aspnes, « Optical properties of thin films », Thin Solid Films, 89 (1982) 249-262.
- [25] H. Looyenga, « Dielectric constants of heterogeneous mixtures », Physica, 31 (1965) 401-406.
- [26] W. Theiss, « Structural and optical properties of porous silicon nanostructures », Eds G. Amato, C. Delerue, H. J. Von Bardeleben - Gordon Breach, (1997).
- [27] M.G. Berger. « Poröse silicium für die mikrooptik, mikrostruktur und optische eigenschaften von einzelschichten und schichtsystemen ». PhD thesis, Forschungszentrum Jülich, (1996).
- [28] P. A. Badoz, D. Bensahel, G. Bomchil, F. Ferrier, A. Halimaoui, P. Perret, J. L. Regolini, I. Sagnes, and G. Vinceny. « Characterisation of porous silicon: structural, optical and electrical properties ». Mat. Res. Soc. Symp. Proc., vol. 283:page 97, (1993).

- [29] Adel Najjar « Amplification optique dans des guides d'onde en silicium poreux dopés aux terres rares » Thèse de doctorat, Université de Rennes 1 (2007).
- [30] H. Diesenger, A. Bsiesy, R. Hérino, and B. Gelloz. « Effect of the quantum confinement on the optical absorption of porous silicon investigated by a new in-situ method ». EMRS Strasbourg, pages I-31, (1999).
- [31] M. Guendouz, M. Ben Salah, B. Le Jeune, S. Rivet, G. Le Brun, and M. Gaillet. « Porous silica composite material for nonlinear optical properties: characterisation by spectroscopic ellipsometry and second harmonic generation ». *Phys. stat; Sol.(c)*, vol. 2(9): page 3371, (2005).
- [32] E.D.PALIK, Hand book of optical constants of solids, Academic Press Handbook Series, Orlando, 1985.
- [33] A.S. Callard « Elaboration et caractérisation de couches diélectriques pour l'optique », Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Lyon, 1996, pp 13-14
- [34] A.S. Callard, A. Gagnaire, J. Joseph, « Fabrication and characterisation of graded refractive index silicon oxynitride thin films », *J.Vac.Sci.Technol.* vol. A15, 1997, pp. 2088-2094.
- [35] S. Winderbaum, F. Yan, O. Reinhold, « Application of plasma enhanced chemical vapor deposition silicon nitride as a double layer antireflection coating and passivation layer for polysilicon solar cells », *J.Vac.Sci.Technol.*, vol. A15, 1997, pp. 201-204.
- [36] S. Strehike, S. Bastide, C. Levy-Clement, « Optimization of porous silicon reflectance for silicon photovoltaic cells », *Solar Energy Materials and solar cells*, vol. 58, 1999, pp. 399-409.
- [37] D.E.Aspnes and A.A.Studna « Dielectric functions and optical parameters of Si, Ge, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, and InSb from 1.5 to 6.0 eV » *PHYSICAL REVIEW B*, VOLUME 27, NUMBER 2 (1983)
- [38] A. Mortezaali, S.Ramezani. Sani, F.Javani Jooni, (2009). « Correlation between Porosity in Porous Silicon and Optoelectronic Property », *Journal of Non Oxide Glasses*, V.1N03, p: 293-299.
- [39] N.M. Ravindra, S. Auluck, V.K. Srivastava, *Phys. Stat. Sol. (b)* 93 (1979) K155

CONCLUSION GENERALE

CONCLUSION GENERALE

Dans l'éventail des énergies qu'on peut qualifier de renouvelables, l'énergie photovoltaïque possède de nombreux atouts ; une majeure partie des technologies solaires développées à ce jour tente de remplir un objectif commun : améliorer le rapport rendement/coût des cellules photovoltaïques. Augmenter les rendements et diminuer les coûts de fabrication ce qui devrait donner plus de poids à l'énergie solaire et accélérer ainsi son exploitation.

En réduisant l'épaisseur des cellules solaires, la génération des photovoltaïques en couche minces utilisée réduit les coûts de fabrication, ainsi que la quantité de matière utilisée. L'objectif de notre travail est de simuler et d'optimiser les cellules solaires en couches minces à base de l'alliage Silicium-Germanium (SiGe) pour l'obtention d'un meilleur rendement de conversion photovoltaïque.

Après une introduction présentant l'évolution de la production mondiale de l'énergie électrique, ainsi que l'intérêt potentiel des énergies renouvelables, nous avons présenté dans un premier chapitre les bases indispensables à la compréhension du sujet. En outre nous avons abordé les notions fondamentales concernant le principe de l'effet photovoltaïque et la présentation d'une source d'énergie durable : le soleil. Ensuite nous avons présenté les paramètres essentiels qui permettent de calculer le rendement d'une cellule solaire à partir de la caractérisation courant-tension et les différents constituants de base d'une cellule photovoltaïque conventionnelle.

Ensuite, nous avons présenté dans le deuxième chapitre les propriétés physiques du silicium, du germanium, et celles de l'alliage $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ qui nous intéresse le plus dans notre travail et pour lequel nous avons fait un état de lieux.

Dans le troisième chapitre nous présenterons les logiciels de simulation AMPS 1D et SILVACO Tcad utilisés dans notre travail.

Finalement dans le dernier chapitre, nous avons fait dans une première partie, une optimisation par simulation d'une cellule solaire à base de SiGe, ayant une structure (P+Si/P SiGe/n SiGe/n+Si) en utilisant logiciel AMPS 1D. Cette optimisation concerne l'épaisseur et le dopage des quatre couches (fenêtre, émetteur, base et BSF) de la cellule solaire, ainsi l'effet de la vitesse de recombinaison superficielle et la température.

A travers l'interprétation des différents résultats obtenus, la valeur optimale de chaque paramètre sera déduite, et le rendement de conversion photovoltaïque atteint 16.826%.

En deuxième partie, et après avoir les valeurs optimales de chaque couche qui donnent le meilleur rendement électrique nous avons étudié l'effet de la porosité, du gap et de la permittivité sur les performances de la cellule solaire optimisée précédente à l'aide de la simulation numérique SILVACO.

Les résultats acquis en simulation montrent que le silicium poreux joue un rôle important dans la conversion photovoltaïque. On obtiendrait un meilleur rendement qui est de l'ordre de 21.57% pour une porosité de $P=90\%$.

Après la comparaison des résultats obtenus, on a pu confirmer que cette couche antireflet pourrait apporter une amélioration significative au rendement énergétique de la cellule.

Ce travail de simulation ouvre la voie à plusieurs perspectives. Nous suggérons de :

Effectuer une étude sur l'effet des paramètres technologies de la couche antireflet en Silicium poreux sur les performances d'une cellule solaire à base de SiGe.

Etudier d'autres matériaux de base III-V ou les couches minces CIGS avec une couche antireflet en silicium poreux.

Résumé:

Au cours des 20 dernières années, il y a eu un intérêt croissant pour les énergies renouvelables et naturelles comme le soleil. Leur principal avantage est qu'il est disponible en permanence pour l'homme. L'une des énergies les plus utilisées est l'énergie solaire photovoltaïque. L'industrie photovoltaïque actuelle utilise le silicium comme matériau de base, deuxième élément sur terre en abondance sous forme de sable. Malgré tous les efforts déployés pour développer le domaine photovoltaïque, les volumes de production sont restés toujours insuffisants. De ce fait l'industrie photovoltaïque doit encore multiplier ses capacités et réduire son coût du kWh. Ceci doit forcément passé par une amélioration du rendement des cellules solaires et une diminution de leur coût de production. Les couches minces présentent des avantages économiques certains dans la production de modules solaire à grand échelle et à rendement important. Les choix se tournent vers des matériaux à fort coefficient d'absorption où les épaisseurs requises seront de l'ordre du μm . Dans cette étude on porte sur la faisabilité d'application de l'alliage SiGe et du silicium poreux (SiP) et de leur intégration dans les cellules solaires à couches minces. L'intérêt permet d'accroître le photocourant grâce à une plus grande absorption dans l'Infra Rouge (IR). Le SiP sert de couche antireflet et de passivation de l'émetteur de la cellule.

Mots clés : SiGe, Silicium Poreux (SiP), cellule solaire...

Summary:

In the last 20 years there has been a growing interest in renewable and natural energies like the sun. Their main advantage is that they are permanently available to mankind. One of the most used energies is the solar photovoltaic energy. The current photovoltaic industry uses silicon as the basic material, the second most abundant element on earth in the form of sand. Despite all the efforts to develop the photovoltaic field, the production volumes have always remained insufficient. Therefore, the photovoltaic industry still needs to increase its capacity and reduce its cost per kWh. This must be done by improving the efficiency of solar cells and reducing their production costs. Thin films have economic advantages in the production of large-scale solar modules with high efficiency. The choices are turned towards materials with high absorption coefficient where the required thicknesses will be of the order of μm . In this study, the feasibility of the application of SiGe alloy and porous silicon (SiP) and their integration in thin film solar cells is investigated. The interest is to increase the photocurrent through to a greater absorption in the Infra Red (IR). SiP is used as an anti-reflection layer and as a passivation layer for the emitter of the cell.

Keywords: SiGe, Porous Silicon (SiP), solar cell

ملخص:

على مدار العشرين عامًا الماضية، كان هناك اهتمام متزايد بالطاقات المتجددة والطبيعية مثل الشمس. الميزة الرئيسية المتاحة للإنسان هي أن الطاقة الشمسية غالبًا ما تكون الأكثر استخدامًا. تستخدم الصناعة الكهروضوئية الحالية السيليكون كمادة أساسية، وهو ثاني أكثر العناصر وفرة على وجه الأرض في شكل رمل. على الرغم من كل الجهود المبذولة لتطوير قطاع الطاقة الكهروضوئية، ظلت أحجام الإنتاج دائمًا غير كافية. نتيجة لذلك، يجب على صناعة الخلايا الكهروضوئية مضاعفة قدراتها وتقليل تكلفتها لكل كيلو وات ساعة. يجب أن يمر هذا بالضرورة من خلال تحسين كفاءة الخلايا الشمسية وخفض تكلفة إنتاجها. تتمتع الطبقات الرقيقة بمزايا اقتصادية محددة في إنتاج وحدات شمسية كبيرة الحجم وعالية الكفاءة. تتحول الاختيارات إلى مواد ذات معامل امتصاص مرتفع حيث تكون السماكة المطلوبة من رتبة ميكرومتر. في هذه الدراسة، نركز على جدوى تطبيق سبائك SiGe والسيليكون المسامي (SiP) ودمجها في الخلايا الشمسية المصنوعة من السيليكون الرقيق. الهدف من استعمال هذه السبائك رفع التيار الكهروضوئي عن طريق زيادة الامتصاص في طيف الأشعة تحت الحمراء. يعمل SiP كطبقة مضادة للانعكاس والتخميل ليعاثر الخلية.

الكلمات المفتاحية : سيليسيوم -جيرمانيوم، سيليكون مسامي، خلية شمسية