# Chapitre IV : Modélisation des couches d'alliages InGaN et SiGe en photovoltaïque

## VI-1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons voir l'impact de l'ingénierie des bandes des alliages semiconducteurs sur l'amélioration des performances des cellules solaires, par le biais de modélisation numériques (AMPS 1D et PC1D). Pour cela deux matériaux d'alliages ont été choisis pour montrer l'intérêt d'une telle ingénierie : les alliages  $In_xGa_{1-x}N$  et  $Si_{1-x}Ge_x$ .

# IV-2. <u>Modélisation des cellules solaires Tandem à base de couches</u> <u>d'alliages In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N</u>

#### IV-2. 1 Objectifs de la modélisation

Les cellules solaires à base de Indium Gallium Nitride (InGaN) ont été reconnues récemment comme de sérieux candidats en photovoltaïque avec des possibilités de hauts rendements de conversion. Pour atteindre les objectifs attendus d'une technologie photovoltaïque comme source d'énergie compétitive par rapport aux énergies fossiles, un plus haut rendement de conversion de la cellule, un faible coût et une stabilité, sont les facteurs dominants. Les matériaux InGaN ont une énergie de gap modulable intéressante variant de 0,7 eV à 3,42 eV et un haut coefficient d'absorption optique de plus de  $10^{5}$ /cm qui indique une meilleure absorption du spectre solaire [1,2]. C'est un matériau très prometteur pour les cellules solaires à couche ultra-minces dans les applications spatiales. Son énergie de gap peut être modulée en variant le taux d'Indium dans l'alliage. La possibilité de réaliser une ingénierie de bande avec le InGaN sur un intervalle qui fournit une bonne correspondance spectrale de la lumière solaire rend le InGaN très adapté pour les cellules solaires photovoltaïques. Il est possible de faire croitre plusieurs couches avec des énergies de gap de InGaN différentes puisque le matériau est relativement insensible aux défauts introduits par le désaccord de mailles entre les couches [3]. Une cellule multi-jonction à deux couches avec des énergies de gap de 1,1 eV et 1,7 eV peut atteindre théoriquement un rendement maximum de 50%. En déposant des multicouches modulées à un large intervalle de l'énergie de gap, un rendement supérieur à 70% est théoriquement prévu [3].

Les couches InGaN de la cellule solaire peuvent être déposées utilisant des techniques à bas coût, comme le dépôt chimique en phase vapeur métal organique ou Metal Organic Chemical Vapor Deposition (MOCVD), Metal Organic Vapor Phase Epitaxy (MOVPE), et l'épitaxie par jet moléculaire ou Molecular Beam Epitaxy (MBE) [4]. En 2007 Jani et al. Ont reporté une cellule solaire

## Chapitre IV: Modélisation des couches d'alliages InGaN et SiGe

à base de GaN/InGaN [5]. Xiaobin Zhang et al. Ont publié un rendement de conversion de 20,284% d'une cellule solaire à base d'une seule jonction InGaN en 2007 [6]. En 2008 le même groupe a publié un rendement de conversion de 24,95% d'une cellule solaire à base d'une simple jonction InGaN et le rendement de conversion de cellules solaires tandem pour double jonction et triple jonction InGaN ont été de 34,34 % et 41,72%, respectivement. Récemment en 2011, S. Ben Machiche a réalisé un rendement de 24,88% pour une cellule solaire InGaN à simple jonction et un rendement de 34,34 % et 37,15% pour des cellules solaires tandem à double et triple jonction, respectivement [8].

Les matériaux du groupe III-V sont largement utilisé pour les cellules solaires tandem pour les applications spatiale, comme les cellules solaires à doubles jonction InGaP/GaAs et triples jonctions InGaP/GaAs/Ge qui ont été développé en 2009. La structure à triple jonction de GaInP/GaAs/Ge montre un rendement de 41,6% [9] mais il doit être noté que l'énergie de gap indirecte de 0,66 eV du Ge n'est pas optimale pour le matériau de la couche de bas dans la cellule à triple jonction. Récemment, en 2012 une nouvelle structure de GaInP/ GaAs/GaInNAs montre un rendement de 44%, qui est le plus grand rendement connu à l'heure actuelle [10]. Mais le problème de ces structures est la complexité du système de l'alliage quaternaire de la cellule et la toxicité aussi bien que le coût du matériau Arsenic (As) qui est une grande barrière de ces systèmes de matériaux.

Nous avons comme but de réduire l'épaisseur pour faire l'économie des matériaux tout en augmentant le rendement de conversion de la cellule avec différents proportion x dans le matériau d'alliage In<sub>x</sub>Ga1-xN avec différents concentrations de dopage. Toutes ces idées sont modélisés dans ce travail et une analyse numérique est effectués en utilisant le simulateur de structures AMPS 1D qui permet de discerner la meilleure structure à base de InGaN à simple, double ou triple jonction.

#### IV-2. 2 Modélisation du dispositif

#### IV-2.2.1 à propos de AMPS-1D

AMPS-1D est un programme de simulation des dispositifs unidimensionnels pour l'Analyse des Structures Microélectroniques et Photoniques développé par l'Université de l'Etat de Pennsylvania, USA (voir figure IV-1). AMPS-1D est basé sur l'équation de continuité et l'équation de Poisson et est utilisé pour analyser le comportement du transport des charges pour les structures de dispositifs semiconducteurs électroniques et opto-électronique..

Dans le cas d'une seule dimension, l'équation de Poisson est donnée par :

$$\frac{d}{dx}\left(-\varepsilon(x)\frac{d\Psi}{dx}\right) = q * \left[p(x) - n(x) + N_D^+(x) - N_A^-(x) + p_t(x) - n_t(x)\right]$$
(IV-1)

# Chapitre IV: Modélisation des couches d'alliages InGaN et SiGe

Où le potentiel électrostatique et l'électron libre n, le trou libre p, l'électron piégée (trapped)  $n_t$ , et le trou piégé  $p_t$  aussi bien que les concentrations des dopant ionisés donneur  $N_D^+$  et les dopants ionisés accepteurs  $N_A^-$  sont tous fonction de la coordonnée de position x. Dans ce cas, eps est la permittivité et q est la valeur de la charge de l'électron.

L'équation de continuité pour les électrons libres dans des états délocalisés de la bande de conduction a la forme :

$$\frac{1}{q}\left(\frac{dJ_n}{dx}\right) = -G_{op}(x) + R(x) \tag{IV-2}$$

L'équation de continuité pour les trous libres dans des états délocalisés de la bande de valence a la forme :

$$\frac{1}{q} \left(\frac{dJ_p}{dx}\right) = G_{op}(x) - R(x) \tag{IV-3}$$

Où  $J_n$  et  $J_p$  sont, respectivement, les densités de courant des électrons et des trous. Le terme R(x) est le tau de recombinaison résultant des recombinaisons bande à bande directe et les recombinaisons SHR indirect à travers les états du gap.  $G_{op}(x)$  est le taux de génération optique en fonction de x qui est dû à l'illumination extérieure imposée.

AMPS-1D contient deux approches différentes du processus de génération/recombinaison. Le premier modèle est la densité d'état ou Density Of States(DOS)/modèle de capture de la section efficace. L'autre modèle est le modèle de la durée de vie du porteur de charge. Dans ce travail, nous utilisons le modèle DOS dans la simulation des cellules solaires InGaN[14].

MMPS-1D - Case1.AMP - QUEUED	And in the local test in the local section in the section of the s
File View Window Help	
Casel.AMP - QUEUED	Layer Information
DEVICE DIAGRAM	Light View Spectral Parameters LAYERS Light View Spectral Parameters View Band Tail Parameters View Band Tail Parameters View Band Tail Parameters View Band Tail Parameters Intel device width: 0.4000 µm Edge grid spacing for all layers: [0.5] nm [Ed]
Front Layers Back Contact	1         -pineScial         Add New         View Gap State         Layer
Device Modeling Approach     SUBMIT CASE       C DOS MODEL     C LIFETIME MODEL     TO QUEUE       Device Operating Conditions     Device Operating Conditions       VOLTAGE     ILLUMINATION     OPERATING       BIASING     CONDITIONS     TEMPERATURE	Delete This     View Lifetime     Layer thickness:     130.0 nm       Center grid spacing:     5.0 nm       GENERAL LAYER PARAMETERS       EPS     13.13     NA     5.00e+017       MUN     325,0000     cm224/4     ND     0.00e+017
Device Structure & Material Parameters FRONT CONTACT LAYER INFO BACK CONTACT	MUP 47.2100 cm <sup>2</sup> 2/V/s EG 1.32 eV CHI 5.56 eV Reset Layer Information

Figure IV-1 : Logiciel AMPS 1D utilisé pour simuler les cellules solaires tandem à base de InGaN.

## IV-2.2.2 Structure des cellules solaires simulées

Nous simulerons trois types de structures photovoltaïques InGaN, nommée simple jonction (SJ), double jonction (DJ), et triple jonction (TJ), respectivement, comme montrées en figure IV-2.



Figure IV-2 : Structure schématique des cellules solaires InGaN : (a) SJ, (b) DJ, et (c) TJ

## IV-2.2.3 Paramètres de la simulation

# a) <u>Equations des paramètres des matériaux utilisés pour la simulation des cellules</u> <u>solaires In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N</u>

Energie de gap [2] :

$$E_g(x) = 0.7x + 3.4(1 - x) - 1.43(1 - x) \quad (@T = 300K)$$
 (IV-4)

Affinité électronique [8,9]: 
$$\chi(x) = 4,1 + 0,7(3,4 - E_g(x))$$
 (IV-5)

Coefficient d'absorption [9] : 
$$\alpha(x, \lambda) = 2, 2.10^5 \sqrt{\frac{1,24}{\lambda} - E_g(x)}$$
 (IV-6)

Mobilité des porteurs [10] : 
$$\mu_i(N) = \mu_{min,i} + \frac{\mu_{max,i} - \mu_{min,i}}{1 + \left(\frac{N}{N_{g,i}}\right)^{\gamma_i}}$$
 (IV-7)

Densité d'états effective dans la bande de conduction [8] :

$$N_c(x) = 0.9x + 2.3(1 - x)^*$$
 (IV-8)

Densité d'états effective dans la bande de valence [4] :

$$N_{\nu}(x) = 5.3x + 1.8(1 - x)^*$$
 (IV-9)

Permittivité relative [8]:  $\varepsilon_r(x) = 14.6x + 10.4(1 - x)^*$  (IV-10)

Les formules avec astérisque (\*) sont obtenues à partir d'un fittage linéaire des paramètres de InN et GaN correspondant. La mobilité des porteurs de l'InGaN est supposé être similaire que GaN, où i=n,p symbolise les électrons et les trous, respectivement, et N la concentration du dopage, tandis que les paramètres  $\mu_{max,i}$ ,  $\mu_{min,i}$ ,  $N_{g,i}$  et  $\gamma_i$  (voir tableau IV-1) dépendent du type de semiconducteur [10].

Tableau VI-1 : Paramètres du modèle utilisés dans le calcul de la mobilité des porteurs

Type de porteurs	$\mu_{max,i}$ (cm <sup>2</sup> V <sup>-1s-1</sup> )	$\mu_{min,i} (\text{cm}^2 \text{V}^{-1\text{s}-1})$	$N_{g,i}(\mathrm{cm}^{-3})$	$\gamma_i$
Electrons	1000	55	$2x10^{17}$	1
Trous	170	3	$3 \times 10^{17}$	2

#### b) <u>Paramètres de la cellule solaire à base de In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N</u>

Les vitesses de recombinaison de surface [11] :  $S_{po}=S_{p1}=S_{no}=S_{nl}=1000$  cm/s, les coefficients de réflexion des surfaces avant et arrière [12,13] :  $R_{Bo}=R_{B1}=0,1$ ; les deux contacts avant et arrière sont supposés ohmique. Dans la simulation, InGaN est traité comme un semiconducteur parfait. Cependant, nous avons :

$$Eg_{u} = Eg_{op} = Eg$$
 (IV-11)

Où Eg<sub>u</sub> est le gap de mobilité et  $Eg_{op}$  le gap optique, généralement  $Eg_u \neq Eg_{op}$  pour les semiconducteurs non-parfait. En supposant une ionisation complète du dopage interne, donc  $n=N_D$  pour le dopage de type n et  $p=N_A$  pour le dopage de type p. Les recombinaisons indirects (recombinaisons SHR) reliées aux impuretés ne sont pas considérées dans la simulation des cellules solaire InGaN. Les paramètres de la simulation des cellules solaires InGaN sont listés dans le tableau IV-2.

**Tableau IV-2** : paramètres de simulation des cellules solaires InGaN (SJ, DJ et TJ) àtempérature ambiante (T=300K)

Type de sc	Couche	X	Eg (eV)	X (eV)	$\frac{N_c}{(\times 10^{-1})}$	$N_v$ (×10 <sup>-</sup> 19 cm <sup>-1</sup> )	${\cal E}_{ m r}$	ND (×10 <sup>17</sup> cm <sup>-3</sup> )	NA (×10 <sup>17</sup> cm <sup>-3</sup> )	$\mu_n(cm^2 V^{-1}s^{-1})$	$\mu_{p}(cm^{2} V^{-1}s^{-1})$	D (nm)
S I	р	0.65	1.32	5.56	1.39	4.075	13.13	0	5	325	47.21	130
21	n	0.65	1.32	5.56	1.39	4.075	13.13	5	0	325	47.21	270
	p1	0.52	1.64	5.33	1.57	3.62	12.58	0	1	685	153.3	30
	n1	0.52	1.64	5.33	1.57	3.62	12.58	1	0	685	153.3	100
	$n1^+$	0.23	1.53	4.71	1.98	2.605	11.37	3	0	433	86.5	10
DJ	p1 <sup>+</sup>	0.52	1.64	5.33	1.57	3.62	12.58	0	100	73.53	3.15	10
	p2	0.84	0.94	5.82	1.12	4.74	13.93	0	1	685	153.3	30
	n2	0.84	0.94	5.82	1.12	4.74	13.93	1	0	685	153.3	100
	$\mathbf{N}^+$	0.23	2.53	4.71	1.98	2.605	11.37	100	0	73.53	3.15	10
	p1	0.39	2.00	5.08	1.75	3.165	12.04	0	1	685	153.3	30
	n1	0.39	2.00	5.08	1.75	3.165	12.04	1	0	685	153.3	70
	$n1^+$	0.39	2.00	5.08	1.75	3.165	12.04	10	0	212.5	16.79	10
	p1+	0.39	2.00	5.08	1.75	3.165	12.04	0	100	73.53	3.15	10
	p2	0.57	1.51	5.42	1.50	3.795	12.79	0	1	685	153.3	30
TJ	n2	0.57	1.51	5.42	1.50	3.795	12.79	1	0	685	153.3	80
	$n2^+$	0.03	3.28	4.19	2.26	1.905	10.53	3	0	433	86.5	10
	$p2^+$	0.57	1.51	5.42	1.50	3.795	12.79	0	100	73.53	3.15	10
	p3	0.89	0.86	5.88	1.05	4.915	14.14	0	1	685	153.3	30
	n3	0.89	0.86	5.88	1.05	4.915	14.14	1	0	685	153.3	80
	$\mathbf{N}^+$	0.1	3.00	4.38	2.16	2.15	10.82	10	0	212.5	16.79	10

#### IV-2.3. Résultats et Discussion

#### IV-2.3.1 Résultats

Plusieurs cellules solaires InGaN tandem sont désignés et sont composées jusqu'à trois jonction pn. La densité de photocourant et le voltage en circuit-ouvert sont simulés pour chaque structure sous une illumination AM1.5 (1sun) dans le but de trouver les paramètres clés pour la fabrication des cellules solaires InGaN à haut rendement. Les résultats préliminaires du rendement ( $\eta$ ), de la densité de courant de court-circuit(Jcc), voltage en circuit-ouvert (Vco) et le facteur de forme (FF) des cellules solaires InGaN(SJ, DJ, TJ) sont montrés dans les caractéristiques J-V de la figure IV-3.



**Figure IV-3** : Rendement ( $\eta$ ), densité de courant de court-circuit (Jcc), voltage en circuit-ouvert (Vco) et facteur de forme (FF) des cellules solaires de InGaN, cercle : simple jonction (SJ), carré : double jonctions (DJ), triangle : triple jonction (TJ).

Nous remarquons que le rendement de conversion est sensible à Eg,  $\chi$ , et  $\alpha(\lambda)$  de chaque couche. Il est aussi affecté par la jonction tunnel et le champ de surface arrière (BSF). Les cellules solaires InGaN simulées sont relativement minces, en considérant les hauts coefficients d'absorptions obtenus par les alliages InGaN. En effet, dans la figure IV-4 nous montrons les différents coefficients d'absorption pour chaque paramètre stœchiométrique x de l'alliage, qui montre clairement l'impact de l'ingénierie des alliages sur les propriétés d'absorption de l'InGaN. Par exemple, l'épaisseur totale de la cellule solaire InGaN en DJ est moins que 300nm.



**Figure IV-4** : Coefficient d'absorption de l'alliage  $In_xGa_{1-x}N$  en fonction du paramètre stochiométrique x.

#### IV-2.3.2 Discussion

Les cellules solaires InGaN caculées sont relativement mince comparées aux structures rapportées [4,7]. Les épaisseurs totales sont 400nm, 290 nm et 370 nm, pour les cellules solaires InGaN à SJ, DJ et TJ respectivement [14]. En considérant ceci, les rendements calculés sont toujours les mêmes que ceux obtenues par d'autres auteurs [4,6,7]. Ceci est expliqué par l'impact du champ répulsif arrière et les jonctions tunnel qui augmentent considérablement le rendement. Nous remarquons qu'avec une cellule à TJ, malgré la perte de photocourant due à une plus petite épaisseur (en comparaison à une SJ), l'augmentation de la tension est assez significative pour permettre une grande amélioration du rendement. En effet, la tension de la cellule sera la somme des tensions des trois jonctions, ce qui démontre clairement l'intérêt d'utiliser de telles structures.

Ces possibilités d'avoir plusieurs jonctions en tandem, ne peuvent avoir lieu qu'en présence d'une ingénierie des bandes avec les alliages semiconducteurs InGaN, qui permettent d'ouvrir des possibilités d'ajustement des bons paramètres de chaque jonction.

## IV-3. Modélisation des cellules solaires à base de couches d'alliages Si<sub>1-x</sub> Ge<sub>x</sub>

## IV-3. 1 Objectifs de la modélisation

L'exploitation du spectre solaire pour une photopile au silicium cristallin est représentée dans la figure IV-5 [15]. La zone A correspond à l'énergie des photons non absorbés parce qu'ils ne sont pas assez énergétiques ; la zone B correspond aux photons dont l'excès d'énergie par rapport au gap est thermalisé. Typiquement, la perte en A est de 23,5% ; elle peut être plus élevée si le matériau n'a pas une épaisseur suffisante ou, si son coefficient d'absorption est trop faible. La zone B, qui correspond à la thermalisation des électrons, représente 33% de perte pour Si.

![](_page_9_Figure_4.jpeg)

Figure IV-5 : Exploitation du spectre solaire AM0 par une photopile Si [15].

![](_page_9_Figure_6.jpeg)

Figure IV-6 : Coefficient d'absorption optique du silicium et du germanium.

# Chapitre IV: Modélisation des couches d'alliages InGaN et SiGe

Pour pouvoir récupérer les photons d'énergie plus basse que le gap du silicium (zone A), il faut trouver un autre matériau semiconducteur, qui a une énergie de gap plus basse, et par conséquent un plus grand coefficient d'absorption dans la partie infrarouge. Le matériau qui répond le mieux à ces exigences est le germanium (voir figure IV-6). Mais, le plus important, est non seulement le photocourant (donc la réponse spectrale), mais aussi la tension de circuit ouvert, et il se trouve que, malheureusement, le germanium à lui seul ne couvre pas cette exigence de tension élevée. En effet une cellule solaire au germanium a un courant de saturation plus grand qu'une cellule au silicium, ce qui influe directement sur la tension de circuit-ouvert (Chapitre 1 Eq. I-5) qui est plus basse. Alors, il s'avère plus judicieux de faire un compromis entre la tension et le courant. Ce compromis nécessite un alliage entre le silicium ; ( a un faible courant de saturation donc bonne tension Vco), et le germanium ( qui a une bonne réponse spectrale donc un bon photocourant Icc), d'où l'intérêt d'une ingénierie de bande dans le cas de l'alliage SiGe.

Plusieurs auteurs ont rapporté les résultats de simulation des cellules solaires à base d'alliages SiGe [15-18]. Nous avons refait les simulations, en focalisons notre étude sur l'influence du taux de germanium (x) et de l'épaisseur (h) de la couche d'alliage sur les propriétés photovoltaïques des cellules solaires, en prenant en compte les recombinaisons interfaciales qui traduisent la relaxation plastique à l'interface Si/SiGe. Enfin nous mettons la lumière sur les différentes techniques qui visent à diminuer la densité de dislocation à l'interface Si/SiGe qui aboutissent à des performances acceptables par rapport à leur coût.

## IV-3. 2 <u>Modélisation du dispositif</u> IV-3. 2.1 <u>Aperçu du logiciel PC1D</u>

Le programme PC1D (personnel computer one-dimensionnel) a été élaboré par Paul A. Basaure durant ses travaux de recherche à la faculté d'ingénierie électrique à l'université d'Iowa, et fut rendu public, pour la première fois, après l'avoir annoncé à la 18ème conférence sur le photovoltaïque IEEE PVSC (décembre 1985).

PC1D a été développé à l'université « New South Wales de Sydney » en Australie. Il permet de simuler n'importe qu'elle structure photovoltaïque, selon les matériaux disponibles en fichier data, en jouant sur les paramètres variables (largeur, surface, dopage, ect...). Les résultats de la simulation sont très proches des résultats expérimentaux, donc on gagnera du temps et de l'argent. Les résultats que nous pouvons visualiser en utilisant le fichier d'excitation « One-Sun.exc » sont : (La valeur du courant de court-circuit ; la valeur de la tension en circuit ouvert ; la valeur de la puissance maximal) et ceux obtenue avec le fichier « Scan-qe.exc » : (La valeur de courant de court-circuit ; la valeur de la puissance maximal).

## a) Les paramètres du dispositif (Device)

- Aire du dispositif (Device) : est la surface du dispositif.
- Surface texturée : La texturisation est très importante, car elle permet de diminuer les pertes par réflexion du rayonnement incident. On peut texturer seulement la face avant, si l'autre face est considérée à l'obscurité.
- Les deux faces sont considérées comme neutres, du fait qu'il n'y a pratiquement pas de charges aux interfaces, c.à.d. qu'il n'y a pas de barrière de potentielle aux surfaces.
- Les couches antireflets, elles sont généralement de la silice (SiO<sub>2</sub>), elle peut être remplacée par d'autres matériaux qui sont transparent au spectre solaire et qui sont donnée dans le logiciel sous forme de fichiers.
- Réflectance optique interne : elle est négligée dans notre simulation, nous considérons que les surfaces qui sont spéculaires et non diffuses.
- Par défaut, l'émetteur et la base sont connectés au circuit, tandis que le collecteur est déconnecté.
- Quatre résistances shunt peuvent être introduites, chacune d'elle peut être conducteur, diode ou condensateur. Dans notre cas nous considérons qu'il n'y a pas d'élément qui peut shunter le circuit.

## b) Les paramètres des régions

- L'épaisseur de l'émetteur est relativement mince par rapport à la base. Dans le cas du silicium elle varie sur un intervalle compris entre 0,1µm et 2,5µm.
- Le matériau utilisé: les paramètres qui le décrivent, sont stockés dans des fichiers d'extension (\*.mat), ils sont fourni avec le logiciel. Les paramètres stockés dans ce fichier sont :
  - \_ La mobilité
  - \_ La constante diélectrique.
  - \_ L'énergie de gap (eV).
  - \_ La concentration intrinsèque ( $cm^{-3}$ ).
  - \_ L'indice de réfraction.
  - \_ Coefficient d'absorption α.
- Type et concentration de dopage: de type n ou p, la concentration maximale est de 10<sup>19</sup>cm<sup>-3</sup> Ce logiciel présente quatre profil de dopages: le profil uniforme, le profil exponentiel, le profil gaussien et le profil erfc.
- Les recombinaisons en volume: le modèle utilisé est basé sur la statistique de Read Shockley-Hall décrivant les recombinaisons par pièges, situées dans la bande de valence.
- Les recombinaisons face avant et arrière.

## c) Les Paramètres d'excitation

Deux fichiers intégrés dans le logiciel permettent de simuler la caractéristique courant-tension et autre caractéristiques en utilisant le fichier « One-Sun.exc », ou la réponse spectrale en utilisant le fichier « Scan-qe.exc».

- Le mode d'excitation : il y a trois modes d'excitation (en équilibre, stationnaire et transitoire). Pour une bonne simulation numérique, le mode transitoire est recommandé.
- Dans la plus part des cas on choisit la température ambiante,  $T=25^{\circ}C$ .
- Il y a deux sources de Thevenin identiques, l'une pour la base et l'autre pour le collecteur.
- Seulement la face avant est éclairée (coté n), par un flux lumineux d'une intensité de 0,1 W/cm<sup>2</sup>. Pour avoir la réponse spectrale, le logiciel fait un balayage sur l'intervalle de longueurs d'onde compris entre [300, 1200] nm. Pour avoir la caractéristique, il utilise directement le fichier d'aire masse « am 15g.spc ».
- La seconde source peut être désactivée, dans le cas où la face arrière n'est pas éclairée.

## IV-3.2.2 Paramètres de la simulation

#### a)<u>Cellule solaire à base de Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> non traité</u>

Nous avons simulé une cellule de type n<sup>+</sup>(Si)/p(Si)/p(SiGe)/p<sup>+</sup>(Si) chaque partie avec des épaisseurs définies (voir figure IV-7 ci-dessous). Aussi, nous avons choisi trois taux de germanium (x=0.1, 0.19 et 0.28) pour une épaisseur de la couche d'alliage variant de 1 à 1000  $\mu$ m. La surface de la cellule est de 4 cm<sup>2</sup> avec une texture à la surface avant pour optimiser le captage du rayonnement. Puisque l'interface Si/SiGe est relaxée plastiquement avec des dislocations, nous avons introduit un courant de saturation J<sub>0</sub>=10<sup>-10</sup>A/cm<sup>2</sup> qui est relié au taux de recombinaison, ce paramètre quantifie la densité de dislocations à l'interface [16]. Pour la surface avant et arrière, nous avons donné des taux de recombinaisons respectifs, 10<sup>3</sup> cm/s et 10<sup>5</sup> cm/s, qui s'accordent avec les simulations de Healy et Green [16].

![](_page_12_Figure_9.jpeg)

Figure IV-7 : Schéma de la cellule solaire simulée avec l'alliage Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>.

#### b) <u>Cellule solaire à base de Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> traité à l'interface</u>

Plusieurs chercheurs ont élaboré des techniques expérimentales pour franchir les obstacles rencontrés dans l'utilisation des couches SiGe, notamment le problème de l'épaisseur critique et de l'apparition des dislocations à l'interface. Leurs techniques reposent essentiellement sur un bombardement ionique lors de l'épitaxie pour créer des défauts ponctuels qui ont un vecteur de Burger opposé à celui des dislocations [20-24], ou en faisant un faible gradient de concentration de Ge [19, 25-27]. Du coût, la densité de dislocation globale était réduite considérablement (jusqu'à 10<sup>3</sup> cm<sup>-2</sup>).

Nous simulons l'effet de telles techniques sur le rendement des cellules solaires à base d'alliage SiGe. Pour cela le seul paramètre qui change est le courant de saturation à l'interface SiGe/Si qui est relié à la densité de dislocation (voir figure IV-8). Nous prenons un courant de saturation affaibli par un rapport de 100,  $J_0=10^{-12}$ A/cm<sup>2</sup> qui traduit une diminution notable dans la densité de dislocation (par rapport à  $10^{-10}$  A/cm<sup>2</sup>).

![](_page_13_Figure_4.jpeg)

![](_page_13_Figure_5.jpeg)

## IV-3.3 Résultats et Discussions

#### IV-3.3 .1 Influence de l'épaisseur et du taux de Ge sur le RQI

Nous exécutons la simulation pour avoir l'évolution du rendement quantique interne (RQI) en fonction de la longueur d'onde pour une cellule solaire à base de SiGe avec différentes épaisseurs (voir figure IV-9) et un taux de germanium fixe (10%). Ensuite nous exécutons la même simulation pour voir quel est l'effet du taux de germanium (voir figure IV-10) sur le RQI de la cellule pour une épaisseur fixe (100µm).

![](_page_14_Figure_1.jpeg)

**Figure IV-9 :** Influence de l'épaisseur de la couche d'alliage SiGe sur le rendement quantique interne (RQI) de la cellule solaire.

Les résultats obtenus sont attendus, car nous savons que l'épaisseur de la cellule est un facteur important pour l'absorption des photons, mais nous constatons que cette dépendance n'est pas linéaire, et ceci est bien confirmé par la loi d'absorption :

$$N(h) = N_{o}(\lambda) \exp - (\alpha(\lambda) h)$$
 (IV-12)

avec  $N_0$ : flux de photons incidents,  $\alpha$  [cm<sup>-1</sup>]: coefficient d'absorption et h [cm]: profondeur de pénétration.

Donc la première conclusion à tirer consiste à remarquer qu'il n'est pas nécessaire de fabriquer des cellules solaires avec des épaisseurs trop grandes (au-delà de 200µm), car les réponses spectrales commencent à s'entasser, sachant que l'épaisseur de la couche influence le prix final de la cellule.

L'effet du taux de germanium est appréciable sur le RQI comme nous pouvons le constater (voir figure IV-10), et ceci est bien dû à la grande valeur du coefficient d'absorption du germanium par rapport au silicium, donc plus l'alliage contient du germanium plus il a un grand coefficient d'absorption global.

![](_page_15_Figure_1.jpeg)

**Figure IV-10 :** Influence du taux de germanium x sur le rendement quantique interne (RQI) de la cellule solaire.

#### IV-3.3.2 Effet de l'épaisseur sur les performances de la cellule

Notre but dans cette simulation consiste à voir quel est l'effet de l'épaisseur dans l'alliage SiGe sur les performances de la cellule solaire. Pour cela nous avons pris des couches d'alliages  $Si_{0.9}Ge_{0.1}$ , avec deux épaisseurs (h=10µm et h=100µm). Les résultats obtenus sont résumés dans le tableau IV-3 et dans les figures IV-11 et IV-12.

Les résultats du tableau IV-3 indiquent que l'épaisseur de la couche influe beaucoup sur le courant de court-circuit  $I_{cc}$  et sur le rendement de conversion, ceci est dû au fait que l'absorption des photons et donc du rendement quantique interne (RQI) d'une cellule avec une couche d'alliage épaisse est plus important.

La figure IV-11 montre les caractéristiques I-V de chaque cas cité précédemment, et il est plus facile de constater sur le graphe l'influence de l'épaisseur sur les paramètres essentiels d'une cellule solaire. La figure IV-12 montre l'évolution de la puissance délivrée par la cellule en fonction du voltage. La puissance maximale délivrée apparaît clairement dans chaque cas.

![](_page_16_Figure_1.jpeg)

**Tableau IV-3 :** Paramètres essentiels d'une cellule solaire à base de SiGe pour h=10 µm et 100 µm.

Figure IV-11 : Influence de l'épaisseur de la couche d'alliage SiGe sur la caractéristique I-V d'une cellule solaire.

![](_page_16_Figure_4.jpeg)

**Figure IV-12:** Évolution de la puissance en fonction du voltage pour deux épaisseurs de cellules à bases de *SiGe*.

#### IV-3.3.3 Effet du taux de Ge sur les paramètres de la cellule

Cette simulation vise à voir quel est l'effet du taux de germanium (x) sur les paramètres essentiels des cellules solaires à base de SiGe, puis de les comparer avec ceux d'une cellule solaire à base de silicium.

Nous rappelons de quelques travaux qui prennent en compte le fait que la densité de dislocation présente dans l'interface (misfit dislocation) ne dépend pas fortement du taux de Ge dans le domaine  $x=\{0.1 - 0.3\}$  [28], donc nous supposons que la densité de dislocation à l'inteface de Si/SiGe a une valeur constante pour les trois valeurs de x et est traduite par un courant de saturation constant ( $J_0=10^{-10}$  A/cm<sup>2</sup>).

Les résultats obtenus sont résumés dans le tableau IV-4 et dans les figures IV-13 et IV-14. Nous constatons que l'augmentation du taux de germanium (x) dans ce type d'alliage a pour effet d'accroître d'une part le courant de court-circuit  $I_{cc}$  à cause de l'augmentation du RQI et diminue d'autre part leur  $V_{co}$  à cause de la réduction de la bande interdite qui a augmenté le courant de saturation de l'alliage et donc selon l'équation (I-5) diminue le  $V_{co}$ .

En comparant les performances des cellules à base d'alliage SiGe avec la cellule à base de silicium, nous constatons que cette dernière donne un meilleur rendement que la cellule à base de SiGe relaxé, ceci est dû à la qualité pseudomorphique de l'interface Si/Si.

Tableau IV-4 : Paramètres essentiels d'une cellule solaire à base de SiGe pour différent taux de
germanium

Épaisseur <i>h</i> (µm)	x	$I_{cc}(mA)$	$V_{co}(mV)$	P <sub>max</sub> (mW)	FF (%)	$\prod_{\max}(\%)$
	0	152,8	651,3	83,6	84	20,9
h =100μm	0,1	161,2	525,4	67,9	80,17	16,97
	0,19	169,4	530,8	71,8	79,85	17,95
	0,28	176,87	523,1	74,2	80,19	18,55

![](_page_18_Figure_1.jpeg)

Figure IV-13: Caractéristiques I-V des cellules solaires à base de SiGe pour différents taux de germanium.

![](_page_18_Figure_3.jpeg)

Figure IV-14 : Évolution de la puissance en fonction du voltage pour différents taux de germanium.

#### IV-3.3.4 Influence de l'épaisseur, du taux de Ge sur le rendement de conversion

Les résultats de la simulation sont illustrés dans le tableau IV-5 et les figures IV-15 et IV-16. Nous avons tracé les résultats sur deux échelles de longueurs. L'échelle logarithmique est utilisée pour montrer que le rendement se stabilise puis chute doucement à des épaisseurs grandes. Le premier résultat à en tirer c'est qu'il n'est pas utile de fabriquer des cellules avec des couches d'alliages Si<sub>1</sub>.  $_x$ Ge<sub>x</sub> trop épaisses, car en plus du fait que l'épaisseur de la couche se paye, les performances diminuent ce qui est encore plus néfaste pour le rapport rendement/coût. Le rendement est de l'ordre de 17% à 18,5% pour des taux de Ge allant de 10% jusqu'à 28% respectivement (voir Tableau IV-5, figures IV-15 et IV-16). Mais ces rendements sont encore petits par rapport à celui d'une cellule à base de silicium (20,9%), car cette dernière ne contient pas de recombinaison aux interfaces vu qu'il n'y a pas de désaccord de maille aux interfaces.

La première conclusion à tirer de cette simulation c'est qu'il est finalement inutile de fabriquer des cellules solaires avec des couches d'alliages  $Si_{1-x}Ge_x$  ayant une épaisseur plus grande que l'épaisseur critique  $h_c$  car une cellule au silicium de même épaisseur a un rendement plus élevé et coûte moins cher du point de vue technologique, car il faut uniquement du silane (SiH<sub>4</sub>) comme gaz source pour l'épitaxie, par contre pour le SiGe il faut en plus du silane ajouter le germane (GeH<sub>4</sub>) qui est plus cher à synthétiser. Par contre il faut préciser que l'utilisation des couches d'alliages Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> dans les cellules solaires prend son intérêt dans deux cas majeurs [15] :

- Lorsque son épaisseur est inférieure à l'épaisseur critique h<sub>c</sub>, car l'interface est pseudomorphique et la contrainte abaisse l'énergie de gap encore plus [19].
- Lorsqu'elles sont utilisées en phase amorphe sur un substrat de silicium amorphe, dans ce cas le rendement de ces cellules est plus important que celui d'une cellule au silicium amorphe, car les phénomènes de recombinaisons sont présents dans tous les cas, par contre la réponse spectrale n'est pas la même.

Nous terminons les simulations en comparant les performances atteintes par les cellules solaires à base de SiGe traitées à l'interface avec celles à base de Si, et ce pour différents taux de Ge. Les cellules solaires ayant une couche d'alliage SiGe traitée à l'interface par les techniques de passivations [20-27] sont modélisées par un courant de saturation à l'interface  $J_0=10^{-12}$ A/cm<sup>2</sup>.[19]

Les résultats de la simulation sont illustrés dans le tableau IV-5 et les figures IV-17 et IV-18. Les résultats de la simulation pour des cellules à base de Si et SiGe n'ont pas été changés car ils n'ont pas subi de changement dans les paramètres. Par contre on s'attend à une augmentation du rendement pour les cellules à base de SiGe traitées et ceci à cause de la modification du courant de saturation. En effet, nous remarquons que les rendements ont augmenté d'une manière remarquable et dans ce cas ils ont largement dépassé les performances d'une cellule à base de silicium pour des épaisseurs raisonnables.

	Rendement de conversion (%)									
	Si		Si <sub>1-x</sub> Ge <sub>x</sub>		Si <sub>1-x</sub> Ge <sub>x</sub> traitées à l'interface					
h(µm)	x=0	x=0,1	x=0,19	x=0,28	x=0,1	x=0,19	x=0,28			
0,1	6,10	4,84	5,04	5,21	6,075	6,28	6,57			
1	09,05	07,40	07,90	08,75	9,32	9,88	11,1			
5	13,92	11,62	12,45	13,52	14,6	15,5	17			
10	16,20	13,40	14,37	15,12	16,8	17,8	19,1			
25	18,60	15,12	16,32	16,92	18,9	20,1	21			
50	19,80	16,30	17,27	17,95	20,3	21,2	22			
75	20,35	16,72	17,70	18,35	20,8	21,6	22,2			
100	20,90	16,97	17,95	18,55	21,1	22,1	22,2			
250	21,8	17,5	18,8	19,00	22	22,4	22,1			
500	22,25	17,82	19,00	19,17	22,2	22,2	22			
750	22,5	18,10	19,00	19,20	22,2	22	21,7			
1000	22,60	18,10	19,02	19,20	22,1	21,8	21,4			

**Tableau IV-5:** Résultats des simulations pour un courant de saturation  $J_0=10^{-10}$  A/cm<sup>2</sup> aux interfaces Si/SiGe,  $J_0=0$  A/cm<sup>2</sup> aux interfaces Si/Si et  $J_0=10^{-12}$  A/cm<sup>2</sup> aux interfaces Si/SiGe.

![](_page_21_Figure_1.jpeg)

**Figure IV-15 :** Rendement de conversion en fonction de l'épaisseur pour différents taux de germanium (échelle logarithmique).

![](_page_21_Figure_3.jpeg)

Figure IV-16 : Rendement de conversion en fonction de l'épaisseur pour différents taux de germanium (échelle linéaire).

![](_page_22_Figure_1.jpeg)

**Figure IV-17 :** les rendements d'une cellule solaire à base de SiGe traitée à l'interface (échelle logarithmique des longueurs).

![](_page_22_Figure_3.jpeg)

Figure IV-18 : les rendements d'une cellule solaire à base de SiGe traitée à l'interface (échelle linéaire des longueurs).

#### **IV-4** Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté les résultats de simulations de cellules solaires ayant des couches d'alliages de différentes compositions et épaisseur pour montrer l'intérêt de l'ingénierie des bandes en photovoltaïque.

Nous avons commencé dans une première partie par simuler les cellules solaires à base d'alliages  $In_xGa_{1-x}N$  par AMPS 1D en simple, double et triple jonction. Les résultats de a simulation ont montré l'intérêt d'avoir 3 jonctions de différentes composition d'alliage pour absorber sélectivement différentes parties du spectre solaire, ce qui fait accroitre le rendement de conversion d'une manière significative. Aussi il a été prouvé que pour telle types de cellules solaires des épaisseurs de couches très minces (de l'ordre de quelques centaines de nanomètres) étaient très favorables à l'augmentation du rendement, et aussi que la présence de jonction tunnel et de champs forts arrière (BSF) provoqué par un excès de dopage augmentaient eux aussi le rendement.

Dans une deuxième partie, nous avons simulé des cellules solaires à base d'alliages  $Si_{1-x}Ge_x$  par PC1D où le taux de germanium était le paramètre de contrôle de l'ingénierie de bandes. Les résultats de la simulation ont montré que l'alliage  $Si_{1-x}Ge_x$  était intéressant puisqu'il permettait de moduler l'absorption des photons dans le coté infrarouge du spectre, et donc permettait de récupérer une partie des photons perdues par le silicium. Cependant, l'augmentation du photo-courant avec l'augmentation du taux de Ge était accompagnée d'une chute importante du Vco à cause des phénomènes de recombinaisons interfaciales des électrons dans les puits de dislocations générées par le désaccord de maille entre le Si et le SiGe. Ceci a pour conséquence que dans le domaine des grandes épaisseurs (audelà de l'épaisseur critique de l'apparition des dislocations), il n'est pas intéressant d'utiliser l'alliage SiGe car une cellule au silicium a de meilleure performances. Par contre les simulations ont montré que s'il y a un traitement interfaciale (par passivation), les performances des cellules avec alliage redeviennent largement supérieure à celles du silicium dans un domaine d'épaisseur donné.

#### **Références bibliographies du chapitre IV**

- Yamaguchi, M., "III-V compound multi-junction solar cells: present and future," Sol. Energy Mater. Sol. Cells 75, 261-269 (2003).
- [2] Wu, J., Walukiewicz, W., Yu, K. M., Ager III, J. W., Haller, E. E., Lu, H., Schaff, W. J., Saito,
   Y. and Nanishi, Y., "Unusual properties of the fundamental band gap of InN," Appl. Phys. Lett. 80, 3967-3969 (2002).
- [3] Matsuoka, T., Okamoto, H., Nakao, M., Harima, H., Kurimoto, E., "Optical bandgap energy of wurtize InN," Appl. Phys. Lett. 81, 1246-1248 (2002).
- [4] Wen, B. et al., "Theoretical Calculation of Conversion Efficiency of InGaN Solar Cells," Chinese Journal of Semiconductors (in Chinese) 28, 1392-1395 (2007).
- [5] Jani, O., Ferguson, I., Honsberg, C., Kurtz, S., "Design and characterization of GaN/InGaN solar cells," Appl. Phys. Lett. 91, 132117 (2007).
- [6] Zhang, X. B. et al., "Simulation of In0.65Ga0.35N single-junction solar cells," J. of Phys. D: Appl. Phys. 40, 7335-7338 (2007).
- [7] Hamzaoui, H., Bouazzi, A. S. and Rezig, B., "Theoretical possibilities of InxGa1-xN tandem PV structures," Sol. Energy Mater. Sol. Cells 87, 595-603 (2005).
- [8] Levinshtein, M. E., Rumyantsev, S. L. and Shur, M. S., [Properties of Advanced Semiconductor Materials], Wiley, Chichester, UK, 1–90 (2001).
- [9] Li, N., "Simulation and Analysis of GaN-based Photoelectronic Devices," Dissertation (in Chinese), Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 3(2005).
- [10] Mnatsakanov, T. T., Levinshtein, M. E., Pomortseva, L. I., Yurkov, S. N., Simin, G. S. and Asif Khan, M., "Carrier mobility model for GaN" Solid-State Electron. 47, 111-115 (2003).
- [11] Aleksiejūnas, R. et al., "Carrier transport and recombination in InGaN/GaN heterostructures, studied by optical four-wave mixing technique" Phys. Status Solidi (c) 0, 2686 (2003).
- [14] Shen X., Lin S., Li F., Wei Y., Zhong S., Wan H., Li J., Photovoltaic Cell and Module Technologies II, edited by Bolko von Roedern, Alan E. Delahoy, Proc. of SPIE Vol. 7045, 70450E, (2008) .
- [15] A. Benyoucef "Contribution à l'Étude des Performances de Matériaux Photovoltaïques à base de Couches d'Alliages Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> et Si<sub>1-x</sub>-yGe<sub>x</sub>C<sub>y</sub>", Mémoire de Magister, Université de Tlemcen (2004)
- [16] S.A. Healy and M.A. Green. "Efficiency enhancements in crystalline Silicon solar cells by alloying with germanium". Sol. Ener. Mat. and Sol. Cells 28 (1992) 273-284.
- [17] M.A. Green. IEEE Trans. Electron Devices ED-31 (1984) 671.

# Chapitre IV: Modélisation des couches d'alliages InGaN et SiGe

- [18] E. Christoffel, L. Debarge and A. Slaoui, "*Modelling of Thin-Film Si- Si1-xGex Solar Cells*", 14 th European Photovoltaic Conference and Exhibition, Barcelona (1997).
- [19] D. Bouchier, P. Boucaud et S. Laval, « Maîtrise des contraintes dans les alliages semiconducteurs de la colonne IV ». De la physique à la technologie. Édition CNRS (1996).
- [20] M. Bauer, M. Oehme, K. Lyutovich, E. Kasper. "*Ion assisted MBE growth of SiGe nanostructures*". Thin Solid Films 336 (1998) 104-108.
- [21] S. Mantl, B. Holländer, R. Liedtke, S. Mesters, H.J. Herzog, H. Kibbel, T. Hackbarth. "Strain relaxation of epitaxial SiGe layers on si (100) improved by hydrogen implantation." Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 147 (1999) 29-34.
- [22] F. Cristiano, A. Nejim, yu. Suprun-Belevich, A. Claverie, P.L.F. Hemment. "Formation of extended defects and strain relaxation in ion beam synthesised SiGe alloys". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 147 (1999) 35-42.
- [23] Yukari Ishikawa, T. Saito, N. Shibata, S. Fukatsu. "SiGe-on-insulator substrate fabricated by low oxygen implantation" Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 147 (1999) 43-48.
- [24] M.S. Oh, M.H. Joo, S. Im, H.B. Kim, H.K. Kim, J.H. Song. "Effects of BF2 + implantation on the strain-relaxation of pseudomorphic metastable Ge0.06Si0.94 alloy layers". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 147 (1999) 49-55.
- [25] E.A. Fitzgerald, Y.H. Xie, M.L. Green, D. Brasen, J. Michel, P.E. Freeland, B.E. Weir. "Elimination of dislocations in heteroepitaxial MBE and RTCVD Ge<sub>x</sub>Si<sub>1-x</sub> grown on paterned Si substrates." J. Electr. Lett., (1990), vol. 19, N°9, p. 949-955.
- [26] E.A. Fitzgerald, Y.H. Xie, M.L. Green, D. Brasen, A.R. Kortan, J. Michel, W.J. Mii, B.E. Weir. "Totally relaxed GexSi1-x layers with low treading dislocation densities grown on Si substrates." Appl. Phys. Lett., (1991), vol. 59, N°7, p. 811-813.
- [27] E.A. Fitzgerald, Y.H. Xie, D. Monroe, P.J. Silverman, L.M. Kuo, M.L. Green, A.R. Kortan, F.A. Thiel, B.E. Weir. "*Relaxed GexSi1-x structures for III-V integration with Si and high mobility two-dimensional electron gases in Si.*" J. Vac. Sci. Technol. B, Microelectronics and nanometer, (1992), vol. 10, N°4, p. 1807-1819.
- [28] T.G. Yugova, V.I. Vdovin, M.G. Mil'vidskii, L.K. Orlov, V.A. Tolomasov, A.V. Potapov, N.V. Abrosimov. "Dislocation pattern formation in epitaxial structures based on SiGe alloys". Thin Solid Films 336 (1998) 112-115.