



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



UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID – TLEMCCEN

THÈSE LMD

Présentée à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

DOCTORAT

Spécialité: ÉNERGIES RENOUVELABLES

Par :

Mme ANNAB Nassima

Sur le thème

Simulation numérique de la haute efficacité photovoltaïque des cellules solaires à base d'InGaN avec ZnO comme couche fenêtre.

Soutenue publiquement le 11 juillet 2024 à Tlemcen devant le jury composé de :

Mr. AMARA Sofiane	Professeur	Université de Tlemcen	Président
Mr. BAGHDADLI Tewfik	Maître de Conférences "A"	Université de Tlemcen	Directeur de thèse
Mr. MERAD Abdelkrim Elhasnaïne	Professeur	Université de Tlemcen	Co-Directeur de thèse
Mr. BOUKLI HACENE Mohammed el Amine	Professeur	Université de Sidi Bel Abbes	Examineur
Mr. KARAOUZENE Lotfi Ibrahim	Maître de Conférences "A"	Université de Tlemcen	Examineur
Mr. LASRI Boumediene	Professeur	Université de Saïda	Examineur

*Laboratoire : Unité de Recherche Matériaux et Energies Renouvelables (URMER)
BP 119, 13000 Tlemcen - Algérie*

Remerciements

Je remercie **Allah** le tout puissant qui m'a permis d'accéder au savoir et m'a facilité l'étude et la compréhension, qui m'a donné le courage, la volonté, la santé, et la patience de mener à terme ce présent travail.

Ce travail a été réalisé à l'**URMER** (Unité de Recherche Matériaux et Energies Renouvelables) à l'Université d'Abou Bekr BELKAID-Tlemcen, J'exprime toute ma profonde gratitude, ma profonde reconnaissance, et mes sincères remerciements à Mr. BAGHDADLI Tewfik Maître de Conférences classe "A" à la Faculté des Sciences -Tlemcen et Mr. MERAD Abdelkrim Elhasnaine, Professeur à l'Université de Tlemcen pour m'avoir encadré tout le long de mon travail, par ses enseignements, ses orientations et ses conseils.

Je remercie très chaleureusement Mr. AMARA Sofiane, Professeur à l'Université de Tlemcen pour m'avoir fait l'honneur de présider ce jury.

Je tiens à remercier l'ensemble des membres du jury qui m'ont fait l'honneur d'évaluer mes travaux : Mr. LASRI Boumediene, Professeur à l'Université Dr MOULAY TAHAR - Saïda, Mr. BOUKLI HACENE Mohammed El Amine, Professeur à l'Université de Djillali LIABES -Sidi Bel-Abbes et Mr. KARAOUZENE Lotfi Ibrahim Maître de Conférences classe "A" à l'Université d'Abou Bekr BELKAID -Tlemcen.

Enfin, je remercie tous : Mes collègues du laboratoire URMER pour leur soutien.

Dédicaces

À

Mes **parents**, Mes **beaux-parents** pour leur amour et leur soutien.

Mon mari **Nedjari Djamel-eddin** pour le soutien, l'amour, la patience, l'écoute,
les sacrifices et la bonne humeur.

Mon frère **Ismail** et ma sœur **Amina** pour leurs amours et leurs encouragements.

Ma tante **Amaria** qui m'a soutenu pendant mes études.

Ma fille "**ELAF**".

Sommaire

Introduction générale	1
<u>Chapitre I : Généralités sur les nitrures d'éléments-III</u>	
I.1 Introduction	4
I.2 Historique	5
I.3 Les composés binaires, ternaires et quaternaires des semi-conducteurs III-N	6
I.3.1 Les composés binaires.....	7
I.3.2 Les alliages ternaires.....	8
I.3.3 Les alliages quaternaires.....	8
I.4 Les propriétés structurales	9
I.4.1 La structure cristallographique.....	9
I.4.2 La polarité.....	11
I.4.3 Les propriétés mécaniques.....	12
I.5 Les propriétés électriques et électroniques	13
I.5. 1 La polarisation spontané.....	13
I.5. 2 La polarisation piézoélectrique.....	15
I.5. 3 La polarisation totale.....	16
I.5. 4 L'expression du gap de l' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	17
I.6 Les propriétés optiques	19
I.6.1 L'indice de réfraction.....	19
I.6.2 Le coefficient d'absorption.....	21
I.6.3 Le gap d'émission.....	23
I.7 L'élaboration de l'$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	25
I.7.1 Le substrat pour l'hétéroépitaxie.....	27
I.7.2 L'épaisseur critique.....	28
I.7.3 Les défauts structuraux.....	28
I.7.4. Le dopage.....	30
I.8 Le nitrure de gallium-indium (InGaN)	32
I.9 Les différentes applications de l'$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ dans l'optoélectronique	33
I.9.1 Les diodes électroluminescentes.....	34
I.9.2 Les cellules solaires.....	35
Conclusion	35

Références du chapitre I	36
---------------------------------------	----

Chapitre II : Cellules photovoltaïques à base de l'InGaN

II.1 Introduction	40
II.2 Les cellules solaires photovoltaïques	41
II.2.1 Le principe de fonctionnement.....	43
II.2.2 L'effet photovoltaïque.....	44
II.2.3 Le schéma électrique équivalent d'une cellule solaire.....	46
II.3 Les caractéristiques électriques d'une cellule solaire	47
II.4 Les paramètres électriques d'une cellule photovoltaïque	49
II.4.1 Le courant de court circuit I_{cc}	49
II.4.2 La tension de circuit ouvert V_{co}	50
II.4.3 le facteur de forme FF.....	51
II.4.4 Le rendement η	52
II.4.5 La réponse spectrale d'une cellule photovoltaïque RS.....	53
II.5 L'efficacité quantique QE	54
II.6 Les cellules photovoltaïques à base d'$In_xGa_{1-x}N$	55
II.6.1 Les cellules solaires à jonction (PN, PIN).....	56
II.6.1.1 Les homojonctions.....	56
II.6.1.2 Les hétérojonctions.....	59
II.6.2 Les cellules solaires à multijonctions.....	65
II.7 Les avantages et les défis de l'InGaN pour les cellules photovoltaïques	67
Conclusion	69
Références du chapitre II	70

Chapitre III : Simulation des cellules solaires à base d'InGaN, résultats et discussions

III.1 Introduction	74
III.2 La description du logiciel SCAPS-1D	75
III.3 La structure et les paramètres de la cellule solaire simulée	77
III.3. a) L'architecture de la cellule solaire étudiée	77
III.3. b) Les paramètres optoélectroniques utilisées dans la simulation	79

III.4 La méthodologie d'optimisation.....	82
III.5 Discussion des résultats.....	83
III.5.1 L'optimisation de la couche active (l'absorbeur).....	84
III.5.1.a) La variation de l'épaisseur de la couche active.....	84
III.5.1.b) La variation du dopage dans l' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ de la couche active.....	85
III.5.1.c) La variation de la concentration de l'indium.....	87
III.5.2 L'optimisation de la couche tampon.....	88
III.5.2.a) La variation de l'épaisseur de la couche tampon.....	88
III.5.2.b) La variation du dopage dans l' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ de la couche tampon.....	89
III.5.2.c) La variation de la concentration de l'indium.....	90
III.5.3 L'optimisation de la couche fenêtre de ZnO.....	92
III.5.3.a) La variation du dopage de ZnO.....	93
III.5.3.b) La variation de l'épaisseur de la couche fenêtre de ZnO.....	94
III.6 Discussions.....	94
Conclusion.....	97
Références du chapitre III.....	98
Conclusion générale	99

Liste des figures

- Figure I.1:** Tableau périodique partiel issu de tableau périodique de Mendeleïev des différents matériaux semi-conducteurs.....(page 7).
- Figure I.2:** La largeur de la bande d'énergie interdite en fonction du paramètre de maille dans le plan [21].....(page 8).
- Figure I.3:** Un exemple de la structure wurtzite est le nitrure de gallium (GaN) [26], (page10).
- Figure I.4:** La structure cubique de type zinc-blende est illustrée par le nitrure de gallium (GaN) [26].....(page 10).
- Figure I.5:** Polarisation Ga et N pour le GaN [29].....(page 14).
- Figure I.6:** Orientation des polarisations piézoélectrique (liée à la compression) et spontanée de l'InGaN sur un pseudo-substrat de GaN [42].....(page 17).
- Figure I.7:** La variation du gap d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de la fraction x de mole In [45],(page 19).
- Figure I.8:** Variation de l'indice de réfraction dans l'InGaN, l'AlGaN et l'InAlN [48],(page 21).
- Figure I.9:** Courbe de transmission et de réflexion du GaN [19].....(page 21).
- Figure I.10:** Courbes d'absorption de couches d'InGaN avec différentes compositions d'indium : a) Hautes concentrations d'indium. b) Faibles concentrations d'indium [51].....(page 23).
- Figure I.11:** Analyse du spectre de cathodoluminescence (CL) à température ambiante d'un pseudo-substrat de GaN-ULDN mesuré à 2 keV révélant l'asymétrie du gap d'émission optique [42].....(page 24).
- Figure I.12:** Schéma synoptique d'un système d'épitaxie par jet moléculaire (MBE) [54],(page 26).
- Figure I.13:** Coupe de la chambre de croissance de la croissance par MOVPE de type T au sein du LMOPS [56].....(page 27).

- Figure I.14:** Energie de formation des défauts natifs dans GaN sous conditions riches en azote en fonction du niveau de Fermi. $E_F = 0$ correspond au maximum de la bande de valence [63](page 29).
- Figure I.15:** Energie de formation des défauts natifs dans InN sous conditions riches en indium en fonction du niveau de Fermi. $E_F = 0$ correspond au maximum de la bande de valence [64].....(page 30).
- Figure I.16:** Les énergies de bande interdite du système d'alliage InGaN couvrent l'ensemble du spectre solaire [14].....(page 34).
- Figure II.1:** illustration d'une configuration de cellule photovoltaïque [5].....(page 42).
- Figure II.2:** Schéma du principe de fonctionnement d'une cellule solaire [6].....(page 43).
- Figure II.3:** Illustration de la structure et du diagramme de bande d'une cellule photovoltaïque [9].....(page 44).
- Figure II.4:** Effet photovoltaïque [11].....(page 45).
- Figure II.5:** Effet PV dans (a) une jonction p-n simple et (b) multijonctions [12].....(page 46).
- Figure II.6:** Schéma électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque réelle [12], (page 47).
- Figure II.7:** Caractéristique $I(V)$ d'une cellule photovoltaïque à l'obscurité (noir) et sous éclairage AM1.5 [14].....(page 48).
- Figure II.8:** le courant de court-circuit ($V=0$).....(page 50).
- Figure II.9:** Caractéristique J-V avec les paramètres importants [22].....(page 52).
- Figure II.10:** Schéma de la cellule solaire pin à double hétérojonction proposée par Zeng et al. [32].....(page 57).
- Figure II.11:**(a) cellule solaire à base de GaInN avec une couche épaisse de $u\text{-Ga}_{0,89}\text{In}_{0,11}\text{N}$ (250 nm) sur un substrat en saphir recouvert d'une couche tampon déposée à basse température (LT) et (b) à base de GaInN cellule solaire avec une couche épaisse de $u\text{-Ga}_{0,90}\text{In}_{0,10}\text{N}$ (250 nm) sur un substrat de GaN autoportant [33].....(page 57).
- Figure II.12:** Schéma de la cellule solaire pin homojonction proposée par Islam et al. [34].....(page 58).

- Figure II.13:** Structure schématique d'une cellule solaire homo-jonction $n\text{-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{UID-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/p\text{-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ [35].....(page 59).
- Figure II.14:** Schéma de la cellule solaire pin en double hétérojonction proposée par Jani et al. [36].....(page 60).
- Figure II.15:** Schéma de la cellule solaire pin hétérojonction proposée par Neufled et ses collègues [37].....(page 60).
- Figure II.16:** Structure de cellule solaire InGaN / GaN avec 12 périodes de 3nm d'épaisseur d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, 0,35 QW et 17nm de barrière de GaN [38].....(page 61).
- Figure II.17:** Schéma de la cellule solaire pin à hétérojonction $n\text{-In}_{0,4}\text{Ga}_{0,6}\text{N}/p\text{-Si}$ proposée par Tranet al. [39].....(page 62).
- Figure II.18:** Schéma de la structure de cellule solaire PIN étudiée par Çakmak et al. [40].
.....(page 62).
- Figure II.19:** Schéma de la structure de cellule solaire à puits quantiques étudiée par Zheng et al. et les caractéristiques électriques de la cellule solaire [41].....(page 63).
- Figure II.20:** Schéma de la structure de cellule solaire à puits quantiques InGaN/GaN étudiée par Liu et al. [42].....(page 64).
- Figure II.21 :** Croquis schématique du réacteur de pulvérisation magnétron réactif RF et de la structure des films minces à hétérojonction fabriqués [43].....(page 64).
- Figure II.22:** Schéma de la cellule solaire à double-jonction simulée par Zhang et al. [45]
.....(page 66).
- Figure II.23:** Schéma de la cellule solaire multijonction proposée par Young et al. [46]
.....(page 66).
- Figure II.24:** (a) Schéma de la cellule solaire InGaN/GaN MQW. (b) Vue de dessus de dispositif fabriqué [47].....(page 67).
- Figure III.1:** La structure étudiée de type PIN de cellule solaire à base de nitrure gallium-indium $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ (page 78).
- Figure III.2:** Simulation d'une cellule solaire à base d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et présentation des différentes couches(page 79).

- Figure III.3:** Le rendement, le facteur de forme, le courant de court-circuit et la tension à vide en fonction de l'épaisseur de la couche active ($i\text{-In}_{0,27}\text{Ga}_{0,73}\text{N}$).....(page 85).
- Figure III.4:** La variation des paramètres de la cellule (η , FF, J_{sc} , V_{oc}) en fonction de la concentration de dopage de la couche active.....(page 86).
- Figure III.5:** Les paramètres de la cellule (le rendement, le facteur de forme, le courant de court-circuit et la tension à vide) en fonction de la composition (x) d'indium de la couche active,(page 87).
- Figure III.6:** La variation de η , J_{cc} , FF et V_{co} en fonction de l'épaisseur de la couche tampon,(page 89).
- Figure III.7:** Les paramètres photovoltaïques de la cellule (η , FF, J_{cc} , V_{co}) en fonction de la concentration de dopage de la couche tampon.....(page 90).
- Figure III.8:** La variation de rendement, de facteur de forme, de courant de court-circuit et de la tension à vide en fonction de la composition x d'indium de la couche tampon.....(page 91).
- Figure III.9:** Variation de concentration de dopage N_D (cm^{-3}) de la couche fenêtre avec une épaisseur de 50 nm.....(page 93).
- Figure III.10:** Le rendement en fonction de l'épaisseur de la couche fenêtre (ZnO) avec $N_D = 10^{18}\text{cm}^{-3}$(page 94).
- Figure III.11:** La caractéristiques courant-tension de la structure d'entrée (1) et la structure optimisée (2) à base d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$(page 95).

Liste des tableaux

- Tableau I.1:** Les paramètres a , c et u sont utilisés pour caractériser la structure cristalline du nitrure de gallium (GaN) et du nitrure d'indium (InN) [27,28]..... (page 11).
- Tableau I.2:** Valeur de la polarisation spontanée pour le GaN et l'InN.....(page 14).
- Tableau I.3:** Constantes piézoélectrique du GaN et de l'InN.....(page 16).
- Tableau II.1:** Des paramètres optiques des composants GaN et InN [53,54].....(page 68).
- Tableau III.1:** Les paramètres utilisés dans l'équation (III-11) permettent de modéliser la mobilité des électrons et des trous.....(page 81).
- Tableau III.2:** Principaux paramètres des matériaux utilisés dans la simulation.....(page 82).
- Tableau III-3 :** La variation des paramètres utilisés dans l'optimisation pour la couche tampon, active et fenêtre.....(page 84).
- Tableau III.4 :** Le rendement η , le facteur de forme FF, le courant de court-circuit I_{sc} et la tension de circuit ouvert V_{co} pour les deux structures..... (page 96).
- Tableau III.5 :** Les paramètres de base obtenus pour cette simulation..... (page 96).

Liste des symboles et des abréviations

PV : l'effet photovoltaïque.

LED : les diodes électroluminescentes.

HEMT : les transistors à haute mobilité électronique.

LDs : les diodes lasers.

ϵ : la déformation.

σ : la contrainte.

E : le module de Young dans un matériau isotrope [GPa].

P_{SP} (InGaN) : la polarisation spontanée de l'InGaN [$C \cdot m^{-2}$].

P_{SP} (InN) et **P_{SP} (GaN)** : la polarisation spontanée des binaires InN et GaN.

b : le paramètre de courbure de la polarisation spontanée dans l'InGaN.

ϵ_{xx} : l'allongement relatif du matériau dans le plan de croissance.

e₃₁ et **e₃₃** : des constantes piézoélectriques [$C \cdot m^{-2}$].

c₃₁ et **c₃₃** : des constantes élastiques [GPa].

a et **a₀** : les paramètres de maille dans le plan de la structure contrainte et à l'équilibre [Å].

E_g (InGaN) : la largeur de la bande interdite d'InGaN.

E_g (InN) : la largeur de la bande interdite d'InN.

E_g (GaN): la largeur de la bande interdite de GaN,

x : la concentration d'indium dans $In_xGa_{1-x}N$.

b : le paramètre de courbure ($b = 1.43$).

n : l'indice de réfraction.

c : la vitesse de la lumière dans le vide.

v : la vitesse de la lumière dans ce matériau.

h : constante de Planck.

$I_i(\lambda)$: l'intensité incidente.

$I_t(\lambda)$: l'intensité transmise.

λ : la longueur d'onde.

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

$\alpha(E)$: le coefficient d'absorption de l'alliage.

E_g : le gap [eV].

α_0 : le paramètre d'ajustement [$\text{eV}^{1/2}/\text{cm}^{-1}$].

PL : la photoluminescence.

CL : la cathodoluminescence.

A_0 : constante.

E et **E_g** : l'énergie des photons et du gap [eV].

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

T : la température.

B₀ : une constante.

MOVPE : l'épitaxie en phase vapeur aux organométalliques.

MBE : l'épitaxie par jet moléculaire.

I_{obs} : la densité de courant d'obscurité.

I_{ph} : la densité de courant photogénéré.

I₀ : le courant de saturation de la diode.

q : la charge élémentaire.

K : la constante de Boltzmann.

T : la température.

$V_T = \frac{K \times T}{q}$: le potentiel thermodynamique.

R_s : la résistance en série

R_p : la résistance en parallèle.

I_m : courant à la puissance maximale de fonctionnement de la cellule photovoltaïque.

V_m : tension à la puissance maximale de fonctionnement de la cellule photovoltaïque.

G : l'irradiance.

q : la charge d'électron.

QE : l'efficacité quantique.

R(λ) : la réflectivité de la cellule.

T(λ) : le rayonnement transmis à travers la cellule.

A(λ) : l'absorption dans les couches non actives (%).

SCAPS : solar cell capacitance simulator.

Ψ : le potentiel électrostatique.

ε₀, ε_r : la permittivité du vide et du semi-conducteur.

n et p : la concentration en porteurs libres.

N_D⁺ et N_A⁻ : la densité des donneurs et accepteurs ionisés.

δdef : la densité de charge des défauts.

J_n et J_p : la densité de courant d'électron et de trou.

δn et δp : sont la distribution des électrons et des trous.

μ_n : la mobilité des électrons.

μ_p : la mobilité des trous.

N : la densité de dopage totale.

γ_{n,p} et Ng_{n,p} : des paramètres empiriques.

η : rendement de conversion électrique.

FF : le facteur de forme.

J_{cc} : la densité de courant de court-circuit.

V_{co} ; la tension de circuit ouvert.

Les nitrures du groupe III, tels que le nitrure d'indium (InN), le nitrure de gallium (GaN), le nitrure d'aluminium (AlN), ainsi que leurs alliages (AlGaN, AlInN, InGaN et AlInGaN), présentent un fort potentiel en tant que matériaux de choix pour les futures générations de dispositifs à semi-conducteurs. Les nitrures d'éléments-III démontrent des caractéristiques électroniques et optiques essentielles, notamment des bandes interdites directes modulables, variant de 6,2 eV pour le nitrure d'aluminium (AlN) à 3,4 eV pour le nitrure de gallium (GaN), et jusqu'à 0,7 eV pour le nitrure d'indium (InN) [1]. La largeur de bande interdite est directe, allant de l'ultraviolet profond (UV) à l'infrarouge, offre de nombreuses possibilités d'applications en optoélectronique, notamment dans le domaine des diodes électroluminescentes (LED), des lasers, des photodétecteurs et des cellules solaires.

L'industrie photovoltaïque représente une solution extrêmement pratique pour la production d'électricité, adaptée aussi bien aux grands parcs solaires qu'aux petites installations autonomes isolées. Elle a d'abord prospéré dans le secteur spatial avant de se généraliser pour s'intégrer sur nos toits, émergent ainsi comme une source d'énergie alternative majeure pour l'avenir. Les cellules solaires III-N sont principalement employées dans des configurations à plusieurs jonctions, dans le but d'améliorer le rendement global des cellules solaires. Elles permettent de superposer plusieurs cellules, chacune ayant une largeur de bande interdite différente, ce qui élargit la plage de spectre solaire absorbée et contribue ainsi à une absorption plus efficace de la lumière solaire. Effectivement, la composition des alliages III-N influe sur leur bande interdite, facilitant ainsi la conception de cellules multijonctions avec des bandes interdites distinctes. La première jonction est conçue avec une largeur de bande interdite plus large pour absorber les photons ultraviolets les plus énergétiques tout en permettant le passage des autres photons. La deuxième jonction est optimisée pour les photons moins énergétiques, et ainsi de suite pour les suivantes.

Au sein des composés ternaires des nitrures du groupe III, l'InGaN a suscité un vif intérêt en raison de ses propriétés optoélectroniques exceptionnelles. Au cours de la dernière décennie, il a été largement reconnu comme le matériau clé et incontournable dans la quête de cellules solaires à haut rendement. Sa flexibilité pour ajuster la largeur de la bande interdite, sa capacité à absorber une large gamme de spectre solaire, et sa robustesse en font un candidat de premier choix pour les applications photovoltaïques de pointe. Au cours de la première période, l'alliage InGaN a été exclusivement évalué pour les applications photovoltaïques à jonction unique avec des matériaux riches en Ga en raison de la croissance mature et des technologies de dopage du GaN.

Notre travail se concentre sur la recherche et le perfectionnement des cellules solaires fabriquées à partir d'InGaN, en se penchant particulièrement sur la simulation et le développement de ces dispositifs à l'aide de logiciel SCAPS-1D.

Ce document est structuré en trois sections distinctes :

Dans le premier chapitre nous présentons les matériaux III-N, leurs propriétés physiques et leurs principales applications. Nous avons examiné ses propriétés structurales, électriques, électroniques et optiques. Nous nous sommes intéressés notamment à l'élaboration des nitrures, en mettant l'accent sur l'InGaN. Nous avons souligné l'importance de l'alliage InGaN dans le développement de nouveaux composants électroniques et optoélectroniques, en particulier dans les domaines des diodes et des cellules solaires. Nous avons mis en évidence les avantages et les applications potentielles de cet alliage dans ces domaines.

Dans le deuxième chapitre nous commençons par fournir une description des cellules photovoltaïques, en abordant leur principe de fonctionnement, l'effet photovoltaïque et le schéma électrique équivalent d'une cellule solaire, puis nous passons à la discussion sur les modules photovoltaïques. Ensuite, nous aborderons les caractéristiques électriques des cellules photovoltaïques, les différentes cellules solaires basées sur l'InGaN. Enfin, nous examinons les avantages et les défis liés à l'utilisation d'InGaN pour les cellules photovoltaïques.

Le troisième et le dernier chapitre détaille les calculs des simulations numériques effectués sur une cellule solaire utilisant une composition d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, avec le logiciel SCAPS-1D. Cette cellule solaire présente une nouvelle structure avec une couche tampon et une couche active principalement constituées d'InGaN, tandis que la couche fenêtre est composée d'oxyde de zinc [$\text{p-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{i-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{n-ZnO}$]. Le but de la simulation est d'optimiser les paramètres optoélectroniques pour améliorer les performances de la cellule solaire.

Chapitre I

Généralités sur les nitrures des éléments-III

I.1 Introduction

Le premier chapitre de notre manuscrit, débutera par une présentation historique de l'utilisation des nitrures dans le domaine de la physique, ainsi que par une revue bibliographique des différents types de composés binaires, alliages ternaires et alliages quaternaires. Nous nous concentrerons particulièrement sur le nitrure de gallium-indium, en examinant ses propriétés structurales et optoélectroniques, ainsi que les techniques d'élaboration et son dopage. Nous passerons ensuite en revue les différentes applications du nitrure de gallium-indium, notamment dans les diodes, et les cellules photovoltaïques à base, qui constitue l'objectif principal de notre travail.

L'énergie solaire représente une source d'énergie renouvelable et inépuisable, offrant une alternative plus fiable et bénéfique pour la santé que les sources d'énergie non renouvelables. La lumière du soleil est disponible presque partout, ce qui en fait une source d'énergie accessible. Grâce à sa longue durée de vie et à sa grande accessibilité, l'énergie solaire représente une source d'énergie renouvelable extrêmement prometteuse [1]. Les cellules solaires sont des dispositifs capables de transformer directement l'énergie solaire en électricité. Ce processus est couramment appelé "l'effet photovoltaïque" (PV). La production de cellules solaires à base de silicium demeure onéreuse et nécessite une quantité importante de matériau. De plus, les cellules solaires à simple jonction en silicium approchent de leur limite théorique d'efficacité maximale (26,7 %) [2,3]. Les chercheurs et les énergéticiens travaillent simultanément à la recherche de nouvelles solutions pour la production de cellules solaires à partir de matériaux innovants. Parmi ces matériaux, l'alliage InGaN est un semi-conducteur intéressant pour le photovoltaïque à couche mince. Initialement étudié pour des applications en diodes électroluminescentes (LED) et en capteurs UV, cet alliage suscite désormais un intérêt croissant pour son potentiel en tant que matériau photovoltaïque [4].

La combinaison de l'azote avec un métal produit un semi-conducteur appelé « nitrure ». Les nitrures, en tant que groupe de matériaux, ont été utilisés pour explorer de nouvelles voies en physique de l'état solide et offrent des perspectives intéressantes pour l'éclairage, les télécommunications et l'électronique moderne. Parmi eux, le nitrure de gallium-indium a été intensivement étudié au cours de la dernière décennie pour ses applications optoélectroniques, notamment dans la fabrication de diodes, de LEDs et de cellules solaires.

Le nitrure de gallium-indium présente un fort potentiel pour les applications photovoltaïques à haute efficacité en raison de son large gap énergétique, qui varie entre 0,7 eV et 3,4 eV, ce qui

lui permet de couvrir l'ensemble du spectre solaire de l'infrarouge à l'ultraviolet. Il est caractérisé par un coefficient d'absorption élevé, une grande mobilité et une longue durée de vie des porteurs, ainsi qu'une bonne résistance mécanique et thermique. En outre, il résiste bien aux champs électriques élevés, aux rayonnements électromagnétiques, aux rayonnements cosmiques et aux particules de haute énergie. En théorie, ces propriétés d'InGaN devraient permettre la réalisation des cellules solaires performantes et très efficaces.

I.2 Historique

Les semi-conducteurs de nitrures d'éléments III ont trouvé leur place dans de nombreux secteurs de notre vie quotidienne, notamment les diodes électroluminescentes (LED), les lasers, les détecteurs ultraviolets et les transistors à haute mobilité électronique (HEMT). Dans le domaine photovoltaïque, ces matériaux sont utilisés dans la fabrication des panneaux solaires. Bien que les cellules solaires ont prouvé leur potentiel pour résoudre la crise énergétique mondiale, leur coût élevé et leur basse efficacité énergétique freinent encore leur adoption généralisée. Cependant, les avancées récentes dans la croissance des semi-conducteurs de nitrures d'éléments III ont donné un nouvel élan à l'industrie solaire.

Warren B. Johnson [5] a été le premier à utiliser le GaN en 1932. Après avoir poursuivi ses recherches sur la structure cristalline du GaN dans des conditions standard, Maruska et Tietjen [6] ont réussi à démontrer en 1969 le premier dépôt de nitrure de gallium (GaN) par épitaxie en phase vapeur d'hydrure, adapté à la caractérisation optique et électrique. Dans les années 80 et au début des années 90, l'utilisation du nitrure de gallium s'est répandue dans le domaine des diodes électroluminescentes et des détecteurs ultraviolets. En effet, c'est à cette période que les progrès significatifs dans la croissance des cristaux de nitrure de gallium ont permis de réaliser des dispositifs optoélectroniques de bonne qualité. Cela a conduit à une augmentation de l'intérêt et de l'utilisation de ce matériau dans d'autres applications, notamment les diodes électroluminescentes à haute luminosité (LED) et les détecteurs ultraviolets sensibles. Depuis lors, les performances des dispositifs à base de nitrure de gallium n'ont cessé de s'améliorer, avec des avancées notables dans les domaines des lasers, des transistors à haute mobilité électronique (HEMT), et des cellules solaires photovoltaïques [7]. En 1986, des avancées significatives ont été réalisées dans l'amélioration de la qualité cristalline du GaN, permettant ainsi la création d'une conduction de type p dans les nitrures d'éléments III. De plus, le contrôle de la conductivité des nitrures d'éléments III de type-n a été réalisé en 1989. [8]. En 1992, Nakamura et ses collègues [9] ont développé une méthode de croissance de couches de GaN à basse température pour limiter la formation de

dislocations à l'interface GaN/Saphir. Cette technique a permis d'atteindre une mobilité électronique exceptionnellement élevée de $900 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ et une concentration d'électrons de fond relativement faible $n \approx 2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. En 1993 et 1994, les premiers transistors GaN ont été produits par MOCVD sur substrats de saphir, et étaient des transistors à effet de champ (Metal Semiconductor Field Effect Transistors MESFET) et à hétérostructure (High Electron Mobility Transistors HEMTs). Ces avancées ont marqué les premières étapes de la fabrication de transistors en GaN [10,11]. En 2002, Plusieurs études ont été menées pour déterminer la largeur de bande interdite de l'InN, qui a confirmé des valeurs proches de 0,7 eV. Cela fait de l'InGaN l'un des rares systèmes capables de produire des bandes interdites allant de 0,7 eV (pour l'InN) à 3,4 eV (pour le GaN) [12,13]. En 2008, En utilisant le modèle de densité d'états (DOS), Shen et al. ont [14] développé une cellule solaire à base d'InGaN, qui fournit des informations plus détaillées sur la recombinaison/génération dans les semi-conducteurs que le modèle de durée de vie et néglige les effets de défaut. Il convient de noter que le semi-conducteur InGaN est couramment utilisé dans les LED modernes pour les couleurs bleues et vertes.

En 2014, le comité Nobel a décerné le prix Nobel de physique à Isamu Akasaki, Hiroshi Amano et Shuji Nakamura pour leur contribution majeure dans l'invention des diodes électroluminescentes bleues efficaces. Les diodes électroluminescentes (LED) sont devenues une source de lumière essentielle dans notre vie quotidienne, et grâce à cette découverte, les sources de la lumière blanche, brillante et économe en énergie ont été rendues possibles. Cette invention a non seulement amélioré notre qualité de vie, mais a également eu un impact significatif sur l'environnement grâce à l'utilisation de l'énergie plus efficace.

I.3 Les composés binaires, ternaires et quaternaires des semi-conducteurs

III-V

Les matériaux III-V sont des alliages composés d'au moins un élément de la colonne III du tableau périodique de Mendeleïev combiné avec au moins un élément de la colonne V. Ces alliages incluent une variété d'éléments tels que l'aluminium, le gallium, l'indium, l'arsenic, le phosphore, l'antimoine et l'azote, dont la liste est représentée sur la figure I.1

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

Figure I.1 : Tableau périodique partiel issu de tableau périodique de Mendeleïev des différents matériaux semi-conducteurs.

Les semi-conducteurs III-N, également appelés « nitrures d'éléments III », sont des composés qui associent l'azote N à un métal, tel que le GaN, l'InN, l'InGaN ou le BInGaN. Ces matériaux font l'objet de recherches intensives pour leur utilisation dans des applications optoélectroniques, telles que les diodes électroluminescentes (LEDs), les diodes lasers (LDs), ainsi que les photodiodes des types (MSM, PN, PIN et APD). Ils sont également étudiés pour leur potentiel dans l'enregistrement optique de haute capacité et les imprimantes laser de haute résolution [15]. Les matériaux III-N sont également employés pour la production de dispositifs électroniques tels que les MODFETs, HEMETs, ainsi que les panneaux solaires offrant des performances supérieures [16]. Cette utilisation s'explique par leurs propriétés remarquables.

I.3.1 Les composés binaires

Les composés binaires, tels que le nitrure de gallium (GaN), le nitrure d'aluminium (AlN), le nitrure d'indium (InN) et le nitrure de bore (BN), sont des combinaisons de l'azote N avec un autre élément simple. Les nitrures d'éléments III ont été étudiés pour la première fois dans les systèmes binaires dans les années 1920 et 1930, par des scientifiques tels que Tiede et al. [17]. En 1932, Johnson et al. [18] ont synthétisé pour la première fois le GaN, dont la structure cristalline a été déterminée comme étant de type wurtzite à des températures et pressions normales. Les nitrures d'éléments III pour les systèmes binaires peuvent couvrir toute la gamme énergétique de 0,77 eV pour l'InN (correspondant à une longueur d'onde de 1771 nm) à 3,42 eV pour le GaN (correspondant à une longueur d'onde de 365 nm), et jusqu'à 6,28 eV

pour l'AlN (correspondant à une longueur d'onde de 200 nm) [19,20], comme illustré dans la figure I.2 Ces composés sont d'un grand intérêt pour les applications optoélectroniques et électroniques en raison de leurs propriétés exceptionnelles.

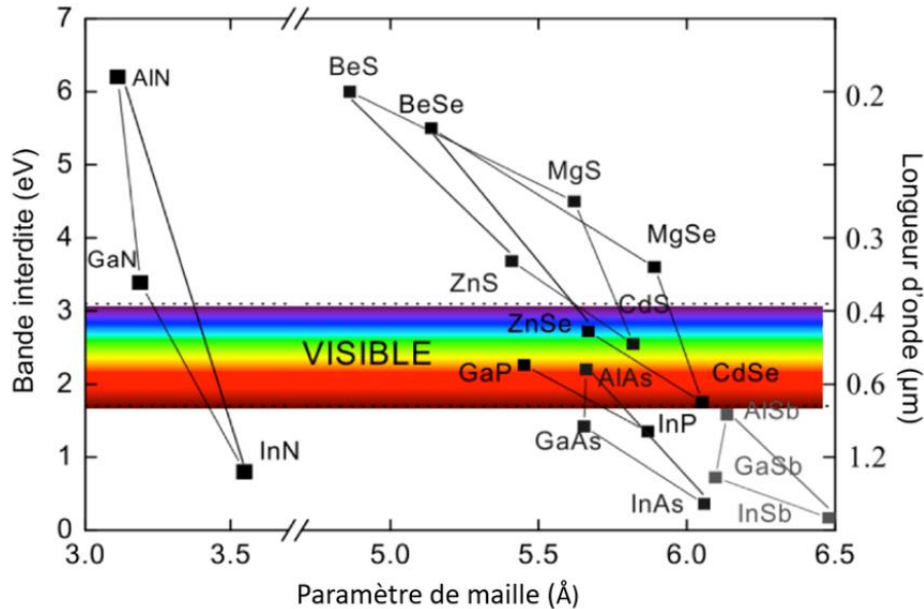


Figure I.2 : La largeur de la bande d'énergie interdite en fonction du paramètre de maille dans le plan [21].

I.3.2 Les alliages ternaires

Les alliages ternaires sont une nouvelle famille de matériaux résultant de la combinaison de deux systèmes binaires, tels que : $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$. En d'autres termes, un alliage ternaire est composé de trois atomes, dont les deux premiers sont issus de deux composés binaires. Par exemple, l'alliage ternaire $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ est composé des binaires GaN et InN. Ces alliages présentent des propriétés intéressantes telles qu'un gap direct variable entre 0,7 eV et 3,42 eV, couvrant ainsi tout le spectre visible du proche infrarouge à l'ultraviolet. De plus, ils ont une capacité thermique élevée et une faible sensibilité aux rayonnements ionisants. Ces caractéristiques les rendent utiles pour une large gamme d'applications optoélectroniques, telles que les diodes électroluminescentes, les diodes lasers et les photodiodes.

I.3.3 Les alliages quaternaires

L'alliage quaternaire des nitrures est un matériau composé de quatre éléments différents, généralement de la famille des nitrures de groupes III-V. Il est formé par la combinaison de

trois composés binaires différents, tels que GaN, InN et AlN. Les alliages quaternaires des nitrures d'éléments III peuvent présenter une gamme de propriétés optiques et électroniques plus large que les alliages ternaires, offrant ainsi des possibilités pour des applications innovantes en optoélectronique, notamment pour les diodes électroluminescentes (LEDs), les diodes lasers (LDs) et les cellules solaires.

Les propriétés des alliages quaternaires des nitrures d'éléments III peuvent être ajustées en modifiant la composition relative de chacun des composants binaires. Par exemple, en ajoutant de l'indium (In) et de l'aluminium (Al) au nitrure de gallium (GaN), on peut obtenir des alliages quaternaires avec des bandes d'énergie plus basses, ce qui leur permet de produire des photons de lumière plus rouges et donc d'élargir le spectre de lumière émise par les diodes électroluminescentes. De plus, les alliages quaternaires présentent une meilleure stabilité thermique que les alliages ternaires, ce qui en fait un choix privilégié pour les applications à haute température.

I.4 Les propriétés structurales

Par la suite, nous aborderons les caractéristiques structurales, y compris la structure cristallographique, la polarité et les propriétés mécaniques.

I.4.1 La structure cristallographique

Un cristal est une structure solide où les atomes sont arrangés de manière régulière et périodique dans les trois dimensions de l'espace, à l'exception des défauts localisés qui peuvent apparaître pendant la croissance du cristal. Ces défauts sont fréquemment observés dans les alliages, tels que les matériaux nitrurés, en raison de la présence de différents types d'atomes occupant les positions cristallines. De plus, des imperfections ponctuelles comme les lacunes et les atomes interstitiels, ainsi que les dislocations et les joints de grain (présentent des orientations différentes à l'interface), perturbent l'ordre de la structure cristalline [22,23].

Les nitrures d'éléments III sont des matériaux cristallins qui peuvent exister sous deux formes cristallines différentes, à savoir la structure zinc-blende qui est une structure cubique et la structure wurtzite qui est une structure hexagonale [24]. La structure la plus stable des nitrures d'éléments III dans les conditions ambiantes est la structure hexagonale représentée dans la figure I.3. Cette structure est caractérisée par trois paramètres : la largeur d'un côté hexagonal a , la hauteur de la maille élémentaire c , et le paramètre interne u , qui décrit la séparation des sous-réseaux des anions (N^{3-}) et des cations (Ga^{3+}) le long de l'axe c [25]. Le paramètre u est

défini comme étant la longueur de la liaison cation-anion divisée par c . Dans un cristal wurtzite idéal, u est égal à 0,375.

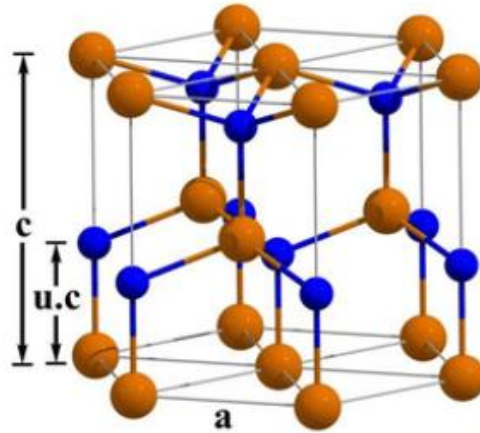


Figure I.3 : Un exemple de la structure wurtzite est le nitrure de gallium (GaN) [26].

La figure I.4 montre la deuxième structure cristalline appelée « zinc-blende », qui est composée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées. L'un des sous-réseaux est constitué d'un élément III et l'autre d'un élément V. Les deux sous-réseaux sont décalés du quart de la diagonale principale, ce qui correspond à une distance de $a = \frac{\sqrt{3}}{4}$ de la longueur du cube, notée "a".

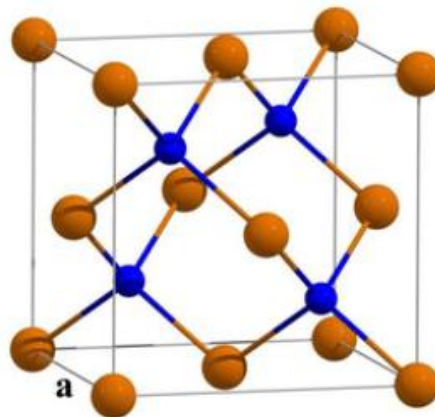


Figure I.4 : La structure cubique de type zinc-blende est illustrée par le nitrure de gallium (GaN) [26].

La formation de la structure zinc-blende est conditionnée par des paramètres de croissance très spécifiques, car elle présente une instabilité thermodynamique. Cela signifie que son état énergétique est relativement élevé et qu'elle a tendance à se convertir en une autre structure

plus stable. Par conséquent, pour obtenir cette structure, il est essentiel de contrôler précisément les variables de croissance, telles que la température, la pression et les taux de croissance, afin de réduire au minimum les processus de transformation et favoriser la formation de la structure souhaitée.

Le tableau I.1 présente les paramètres de maille des nitrures de gallium (GaN) et d'indium (InN) pour les deux structures cristallines.

	Wurtzite			Cubique
	a (Å)	c (Å)	u	a (Å)
GaN	3.189	5.185	0.377	4.47
InN	3.54	5.7	0.378	4.96

Tableau I.1 : Les paramètres a, c et u sont utilisés pour caractériser la structure cristalline du nitrure de gallium (GaN) et du nitrure d'indium (InN) [27,28].

Les valeurs relatives aux paramètres cristallins du GaN et de l'InN sont présentées dans le tableau, décrivant ces matériaux à l'état massif. Cependant, il convient de noter que ces valeurs peuvent différer lorsqu'il s'agit de couches épitaxiales, qui sont des couches minces de ces matériaux déposées sur un substrat. Les contraintes exercées par le substrat peuvent en effet modifier les propriétés cristallines de la couche épitaxiale, entraînant des variations dans des paramètres tels que la constante de maille et la hauteur de la maille. Par conséquent, il est essentiel de prendre en compte ces variations lors de la croissance de couches épitaxiales de nitrures d'éléments III afin de garantir les propriétés optiques et électriques souhaitées.

Théoriquement, il est possible d'identifier une troisième structure cristalline pour les nitrures d'élément III, connue sous le nom de structure cubique à face centrée (CFC) ou NaCl. Cette structure se caractérise par sa nature cubique, où chaque sommet du cube est occupé par un atome, tandis qu'un atome supplémentaire se trouve au centre de chacune des six faces. Elle est classée dans le groupe de symétrie O_h^5 [19]. Cependant, l'obtention de cette structure pour le GaN est extrêmement difficile, car elle nécessite des pressions très élevées (52 GPa) pour être produite [19].

I.4.2 La polarité

La structure wurtzite est caractérisée par deux sous-réseaux qui se chevauchent, celui des cations (Ga^{3+}) et celui des anions (N^{3-}), décalés selon l'axe c . Ce décalage est exprimé par le paramètre interne u . Contrairement à la structure cubique à faces centrées, cette structure est dite non-centrosymétrique, c'est-à-dire que les centres de masse des deux sous-réseaux ne se superposent pas, créant ainsi une polarisation interne et une propriété piézoélectrique.

En d'autres termes, lorsque des contraintes externes sont appliquées à la structure cristalline wurtzite, elle génère une charge électrique interne qui peut être exploitée pour produire des signaux électriques, ou inversement, lorsque des signaux électriques sont appliqués, ils peuvent induire une déformation dans le cristal. Il est important de noter que ces propriétés peuvent varier pour des couches épitaxiales en raison des contraintes dues à l'interface avec le substrat.

I.4.3 Les propriétés mécaniques

L'évaluation des propriétés mécaniques d'un matériau consiste à analyser sa réaction face à une force appliquée, appelée contrainte. Cette réponse est généralement évaluée en mesurant la déformation ε du matériau, qui représente le changement de forme subi par celui-ci en réponse à la contrainte.

La corrélation entre la contrainte et la déformation est visualisée à travers une courbe de contrainte-déformation. Cette courbe permet d'extrapoler les propriétés mécaniques du matériau, telles que sa résistance à la traction, sa dureté et sa ductilité. Ainsi, la déformation ε joue un rôle essentiel en tant que paramètre significatif dans la caractérisation des propriétés mécaniques d'un matériau.

$$\varepsilon = \frac{x-x_0}{x_0} \quad (\text{I.1})$$

Avec :

x : le paramètre de maille après déformation.

x_0 : le paramètre de maille sans contrainte.

Lorsque le matériau est soumis à une force de traction, la déformation sera positive, tandis que lorsqu'il est soumis à une force de compression, la déformation sera négative.

La relation entre la déformation et la contrainte, σ , peut être exprimée par la loi de Hooke. [19] :

$$\sigma = E \times \varepsilon \quad (I.2)$$

Avec :

E : le module de Young dans un matériau isotrope [GPa].

I.5 Les propriétés électriques et électroniques

En analysant les caractéristiques électriques et électroniques des nitrures d'éléments III, telles que la polarisation spontanée, la polarisation piézoélectrique (induite) et la polarisation totale, ainsi que l'expression du gap d'InGaN.

I.5. 1 La polarisation spontanée

La polarisation spontanée entraîne une séparation spatiale des électrons et des trous dans les nitrures, créant ainsi une accumulation de charges aux extrémités de la couche perpendiculairement à l'axe c (interface substrat/couche épitaxie ou surface de la couche épitaxie). Cette accumulation de charges peut modifier les propriétés électriques du matériau. Il est donc essentiel de déterminer la direction de cette polarisation pour pouvoir la contrôler.

Le traitement de surface post-croissance et le processus de croissance peuvent être utilisés pour orienter la polarisation dans la direction souhaitée. Par exemple, si la première couche atomique déposée est composée d'azote, la dernière couche sera constituée d'atomes de gallium. Cela entraînera un excès de trous à la surface et une polarisation de type Ga [0 0 0 1]. En revanche, si la première couche est composée de gallium, la dernière couche sera formée d'azote, ce qui induira un excès d'électrons. Dans ce cas, la polarisation sera de type N et l'axe de croissance sera désigné par [0 0 0 1].

La figure I.5 représente la polarisation gallium et de l'azote pour le nitrure de gallium.

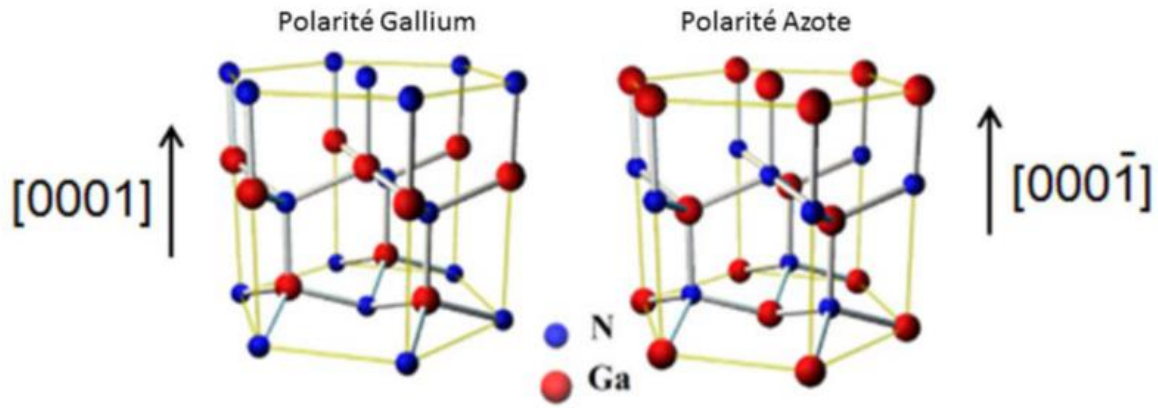


Figure I.5 : Polarisation Ga et N pour le GaN [29].

La polarisation spontanée peut jouer un rôle important dans le comportement d'un composant. Par exemple, si le champ électrique résultant de la polarisation sépare spatialement les électrons et les trous, réduisant ainsi les recombinaisons radiatives, la polarisation peut améliorer les performances du composant lorsqu'il s'agit de collecter les porteurs de charge. En revanche, si le composant vise à émettre de la lumière, la polarisation peut limiter le rendement de celui-ci [30]. Dans le tableau I.2, on trouve les valeurs de la polarisation spontanée pour les composés binaires GaN et InN. Il est important de noter que le signe de la polarisation spontanée est toujours négatif pour ces deux matériaux.

	GaN		InN	
	Bernardini et al. [24]	Vurgaftman et Meyer [31]	Bernardini et al. [24]	Vurgaftman et Meyer [31]
$P_{SP}(\text{C.m}^{-2})$	-0.029	-0.034	-0.032	-0.042

Tableau I.2 : Valeur de la polarisation spontanée pour le GaN et l'InN.

Pour le matériau ternaire $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, la polarisation spontanée est décrite par une relation non linéaire qui relie la composition et les constantes P_{sp} des deux binaires GaN et InN. Dans cette relation, un troisième terme est ajouté pour tenir compte de la correction quadratique liée à une constante b , qui représente le paramètre de courbure. Cette relation est exprimée de la manière suivante [32, 33] :

$$P_{SP}(\text{InGaN}) = x \times P_{SP}(\text{InN}) + (1 - x) \times P_{SP}(\text{GaN}) - b \times x \times (1 - x) \quad (\text{I.3})$$

Avec :

x : la concentration en indium dans l' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

$P_{SP}(\text{InGaN})$: la polarisation spontanée de l' InGaN [C m^{-2}].

$P_{SP}(\text{InN})$ et $P_{SP}(\text{GaN})$: la polarisation spontanée des binaires InN et GaN .

b : le paramètre de courbure de la polarisation spontanée dans l' InGaN .

Dans leurs études respectives, Bernardini et al. [32] et Fiorentini et al. [33] ont fourni des informations sur les propriétés du matériau InGaN . Ils ont spécifiquement rapporté un paramètre de courbure de $b = 0,037 \text{ C.m}^{-2}$ pour l' InGaN . Ce paramètre de courbure est une mesure de la non-linéarité de la relation entre la composition du matériau et la polarisation spontanée. En d'autres termes, il indique comment la polarisation spontanée varie en fonction de la composition du matériau ternaire InGaN . Cette valeur de b fournit des informations précieuses pour comprendre les propriétés électriques et optiques de l' InGaN .

I.5. 2 La polarisation piézoélectrique (induite)

La structure cristalline du nitrure de gallium est à l'origine de la polarisation piézoélectrique. La piézoélectricité se réfère à la capacité de certains matériaux à générer un dipôle électrique proportionnel à la contrainte mécanique (tension ou compression) qui les déforme. Lorsqu'une pression est appliquée sur les nitrures d'éléments, leur structure cristalline s'ajuste aux contraintes en modifiant les paramètres de maille (a , c) par rapport à ceux de l'état massif du matériau (a_0 , c_0). Cela entraîne une polarisation différente de la polarisation spontanée, connue sous le nom de polarisation piézoélectrique (P_{PZ}).

La polarisation piézoélectrique est due à plusieurs facteurs, tels que la non-centrosymétrie de la structure cristalline, la nature fortement ionique des liaisons chimiques et les déformations présentes dans le cristal. La valeur de cette polarisation peut être calculée à l'aide d'une formule spécifique [34] :

$$P_{PZ} = 2 \times \epsilon_{xx} \times \left(e_{31} \frac{e_{33} \times c_{13}}{c_{33}} \right) = 2 \times \left(\frac{a-a_0}{a_0} \right) \times \left(e_{31} - \frac{e_{33} \times c_{13}}{c_{33}} \right) \quad (\text{I.4})$$

Avec :

ϵ_{xx} : l'allongement relatif du matériau dans le plan de croissance.

e_{31} et e_{33} : des constantes piézoélectriques [$C.m^{-2}$].

c_{31} et c_{33} : des constantes élastiques [GPa].

a et a_0 : les paramètres de maille dans le plan de la structure contrainte et à l'équilibre [Å].

En examinant les constantes piézoélectriques et élastiques du GaN et de l'InN répertoriées dans le tableau I.3, on peut observer que l'expression ($e_{31} - \frac{e_{33} \times c_{13}}{c_{33}}$) est toujours négative. Par conséquent, la polarisation piézoélectrique des nitrures III est également positive lorsqu'ils sont sous tension sur leur substrat ($a < a_0$) et négative dans le cas inverse ($a > a_0$).

	$e_{31}(Cm^{-2})$	$e_{33}(Cm^{-2})$	$c_{31}(GPa)$	$c_{33}(GPa)$
GaN	-0.49 [24] -0.32 [35]	0.73 [24,35]	106[36] ,121[37], 92[38] ,96[39], 100[40]	398[36] ,182[37] ,224[38] ,324[39], 392[40]
InN	-0.57 [24]	0.97 [24]	92[41] ,94[40]	224[41] ,200[40]

Tableau I.3: Constantes piézoélectrique du GaN et de l'InN.

Selon les études théoriques réalisées par Bernardini et Fiorentini [32], contrairement à la polarisation spontanée, il a été suggéré que la polarisation piézoélectrique de l'alliage InGaN pourrait être décrite par une loi de Vegard :

$$P_{PZ}(In_xGa_{1-x}N, \epsilon_{xx}) = x \times P_{PZ} \times (InN, \epsilon_{xx}) + (1 - x) \times P_{PZ} \times (GaN, \epsilon_{xx}) \quad (I.5)$$

Cette constatation est assez remarquable et résulte, selon les auteurs, de l'effet piézoélectrique du second ordre particulièrement significatif des binaires InN et GaN. En tenant compte de cette non-linéarité, les auteurs démontrent que l'évolution de la polarisation piézoélectrique de l'alliage $In_xGa_{1-x}N$ en fonction du ratio des éléments binaires, conformément à la loi de Vegard, est en accord avec les calculs effectués pour un alliage complètement aléatoire.

I.5. 3 La polarisation totale

Lorsqu'il n'y a pas de polarisation externe, la polarisation totale d'un matériau de structure wurtzite est la combinaison de la polarisation spontanée et de la polarisation piézoélectrique :

$$\vec{P} = \vec{P}_{SP} + \vec{P}_{PZ} \quad (I.6)$$

La polarisation totale dans un matériau peut être positive ou négative, et son orientation est déterminée par la présence de contraintes de tension ou de compression dans la structure. Lorsque le matériau est soumis à une tension, la polarisation spontanée et la polarisation piézoélectrique ont la même orientation, ce qui entraîne une augmentation de la polarisation totale. En revanche, lorsque le matériau est soumis à une compression, les deux polarisations ont des orientations opposées, ce qui entraîne une diminution de la polarisation totale. La figure I.6 est une représentation schématique de l'orientation des différentes polarisations dans le cas spécifique d'une structure InGaN/GaN, soumise à une compression [42].

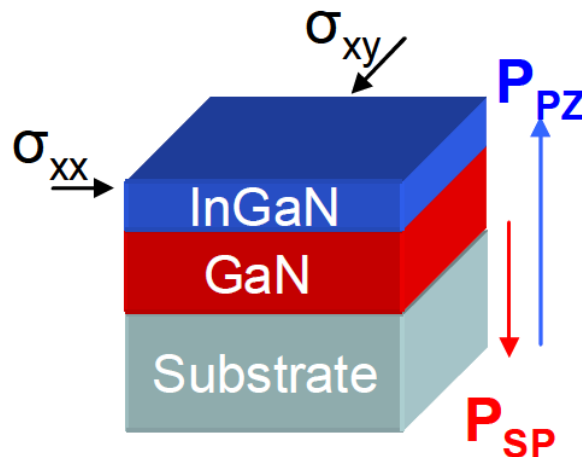


Figure I.6: Orientation des polarisations piézoélectrique (liée à la compression) et spontanée de l'InGaN sur un pseudo-substrat de GaN [42].

I.5. 4 L'expression du gap de l' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

L'une des principales caractéristiques étudiées dans le cas de l'InGaN, tout comme pour les autres nitrures d'éléments III, est la largeur de la bande interdite [4]. Ce gap peut être décrit en utilisant la loi de Vegard modifiée, qui relie les valeurs des gaps de l'InN et du GaN. Les deux semi-conducteurs InN et GaN à gap direct. Un semi-conducteur est considéré à gap direct lorsque le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction se trouvent au même point dans l'espace des vecteurs d'onde des électrons. En revanche, un semi-conducteur à gap indirect présente un maximum de bande de valence et un minimum de bande de conduction situés à des positions distinctes dans l'espace des vecteurs d'onde.

Après de nombreuses années de débat, la structure de bande de l'InN est maintenant solidement établie, avec une largeur de la bande interdite de 0,7 eV [43]. En ce qui concerne le GaN, elle est de 3,42 eV. [43].

La loi de Vegard, utilisée pour déterminer le gap de l'InGaN, est une loi empirique qui propose que les propriétés d'un alliage (comme la largeur de la bande interdite, le paramètre de maille, les constantes élastiques, etc.) puissent être obtenues en effectuant une interpolation linéaire des valeurs correspondantes des composants. Cependant, dans le cas du gap d'InGaN, les valeurs mesurées ne correspondent pas exactement aux résultats de l'interpolation linéaire. Pour mieux ajuster les données expérimentales, un paramètre de courbure est introduit dans l'expression de la loi de Vegard. Ainsi, le gap d'InGaN est déterminé en utilisant une loi de Vegard avec un paramètre de courbure [43] :

$$E_g(\text{InGaN}) = x \times E_g(\text{InN}) + (1 - x) \times E_g(\text{GaN}) - x \times (1 - x) \times b \quad (\text{I.7})$$

Où :

$E_g(\text{InGaN})$: la largeur de la bande interdite d'InGaN.

$E_g(\text{InN})$: la largeur de la bande interdite d'InN.

$E_g(\text{GaN})$: la largeur de la bande interdite de GaN,

x : la concentration d'indium dans $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

b : le paramètre de courbure ($b = 1.43$) [44].

La figure I.7 présente l'évolution du gap de l' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en fonction de la fraction molaire d'indium (In). Cette courbe permet de visualiser comment le gap du matériau varie lorsque la quantité d'indium dans l'alliage est modifiée. En augmentant la fraction molaire d'indium, on observe généralement une diminution du gap de l' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Cela signifie que la largeur de la bande interdite du matériau devient plus étroite à mesure que la concentration d'indium augmente. Cette tendance peut être utilisée pour ajuster les propriétés optoélectroniques de l'alliage InGaN en modifiant la composition du matériau. La figure I.7 permet donc de visualiser comment la variation de la fraction molaire d'indium influe sur les propriétés optiques du matériau.

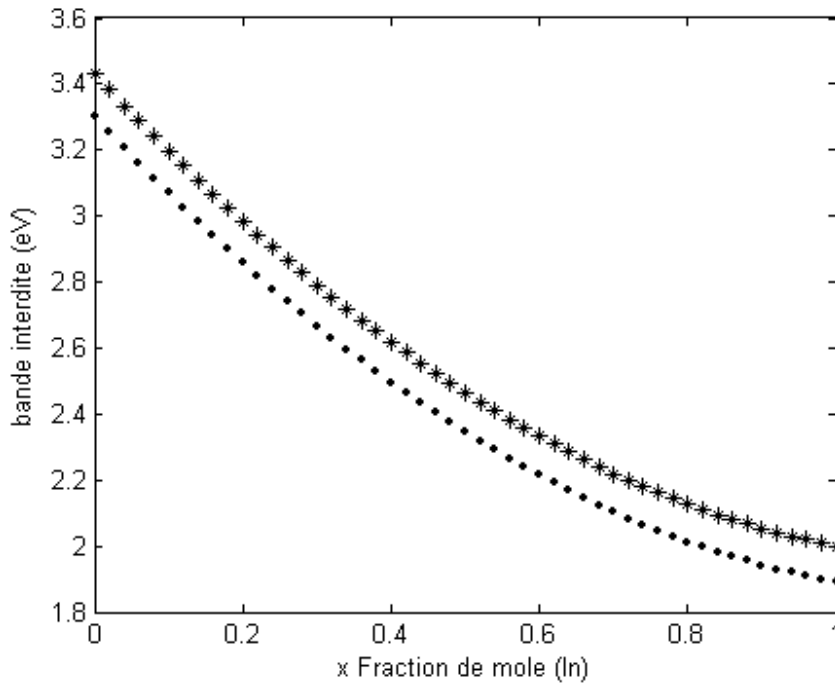


Figure I.7 : La variation du gap d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de la fraction x de mole In [45].

Il est important de souligner que les mesures de la largeur de la bande interdite de l' InGaN ont été réalisées uniquement pour des plages de compositions limitées en indium, ce qui a conduit à une grande disparité des valeurs du paramètre de courbure (b) rapportées dans la littérature. Cette disparité peut être attribuée à plusieurs facteurs, tels que la valeur du gap d' InN considérée, la méthode de mesure du gap d' InGaN utilisée, ainsi que l'effet des contraintes sur les propriétés du matériau.

En raison de ces différentes variables, il est important d'exercer une certaine prudence lors de l'interprétation et de la comparaison des valeurs de b rapportées dans les études sur l' InGaN . Des recherches supplémentaires sont nécessaires pour clarifier et établir de manière plus précise les valeurs du paramètre de courbure pour différentes compositions d' InGaN .

I.6 Les propriétés optiques

Les caractéristiques optiques d'un matériau sont principalement définies par son indice de réfraction, son coefficient d'absorption et le gap d'émission.

Ces propriétés jouent un rôle crucial dans les composants optoélectroniques, car elles influencent le comportement de la lumière à l'intérieur de ces composants. Par exemple, dans un composant composé de différents matériaux, la lumière a tendance à se propager davantage dans les matériaux ayant un indice de réfraction plus élevé. Cela permet de

confiner la lumière dans une couche spécifique, comme dans les lasers. De plus, ces propriétés sont également essentielles dans les applications des cellules solaires, où elles permettent d'améliorer l'absorption de la lumière et donc d'augmenter l'efficacité des cellules solaires.

I.6.1 L'indice de réfraction

La propagation de la lumière est déterminée par l'indice de réfraction le plus élevé. Cette caractéristique est essentielle pour contrôler la propagation de la lumière à travers un composant composé de plusieurs matériaux. L'indice de réfraction joue également un rôle crucial dans les applications photovoltaïques, car il permet d'améliorer l'efficacité d'absorption de la lumière dans les cellules solaires, ce qui se traduit par un rendement plus élevé.

L'indice de réfraction d'un matériau peut être calculé en divisant la vitesse de la lumière dans le vide, c , par la vitesse de la lumière dans ce matériau, v , selon la relation suivante :

$$n = \frac{c}{v} \quad (\text{I.8})$$

La vitesse de la lumière dans un matériau n'est pas constante et varie en fonction de la longueur d'onde λ . Pour le matériau GaN, son indice de réfraction est d'environ 2,3 [46], tandis que pour l'InN, il est d'environ 2,9 dans le domaine infrarouge [47]. Des travaux expérimentaux menés par Anani et al. [48] ont permis d'estimer la variation de l'indice de réfraction des alliages de nitrures d'éléments III en fonction de l'énergie des photons absorbés par le matériau :

$$E_g = \frac{h \times c}{\lambda} \quad (\text{I.9})$$

Avec :

h : constante de Planck.

D'après la figure I.8, on peut observer que la relation entre l'indice de réfraction et la composition suit une forme quadratique. Cela indique la présence d'un paramètre de courbure dans l'équation qui lie ces valeurs. La courbe obtenue confirme ainsi la nature quadratique de cette relation.

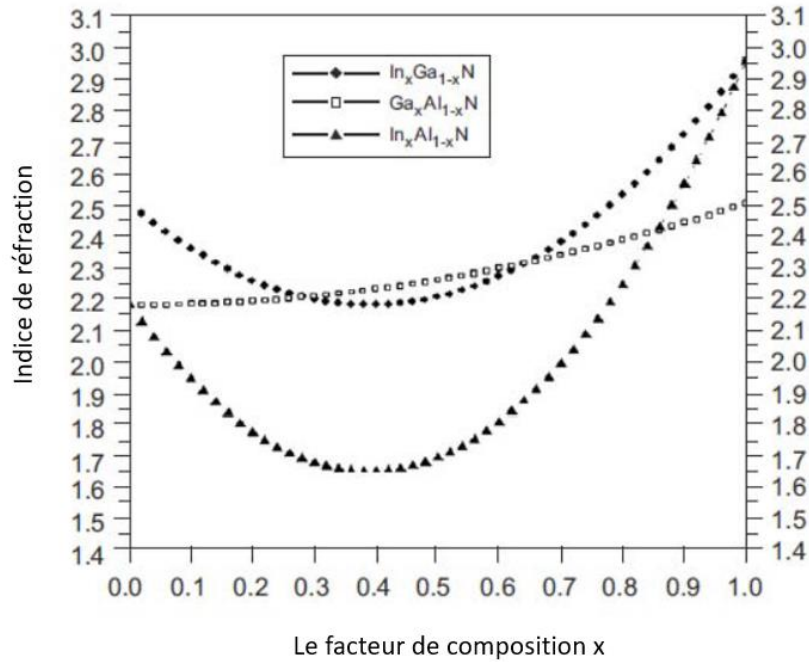


Figure I.8 : Variation de l'indice de réfraction dans l'InGaN, l'AlGaN et l'InAlN [48].

Pour le dioptre air/GaN, on observe un coefficient de réflexion de 39 % et un coefficient de transmission de 61 %.

Des données expérimentales sous forme de courbes de transmission et de réflexion ont été présentées pour un pseudo-substrat de GaN (épaisseur de 3,5 μm sur saphir) dans la figure I.10 [19]. On observe un seuil de transmission autour de 360 nm, qui correspond au gap du GaN.

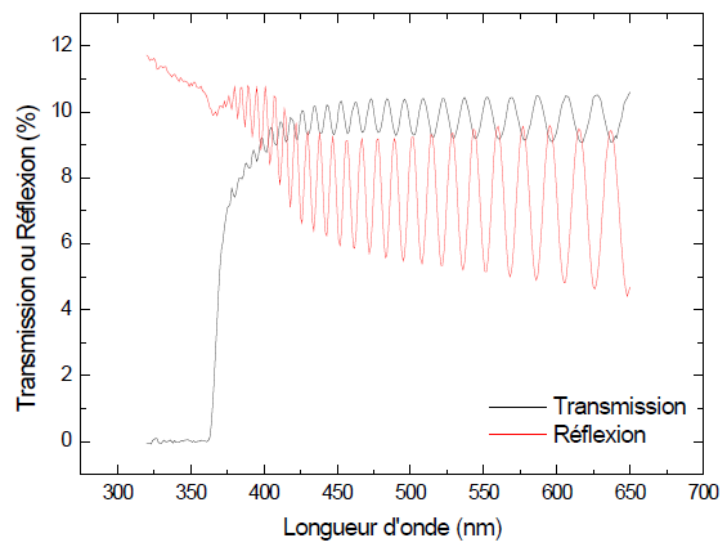


Figure I.9 : Courbe de transmission et de réflexion du GaN [19].

I. 6.2 Le coefficient d'absorption

Dans le contexte des cellules solaires, le coefficient d'absorption revêt une importance capitale, car il détermine la quantité de photons qui sont absorbés par le matériau, et donc la quantité de porteurs qui peuvent être générés. Ainsi, lors de la fabrication de cellules solaires, les matériaux présentant des coefficients d'absorption élevés sont préférés.

L'absorption à travers une couche de semi-conducteur d'une épaisseur donnée peut être décrite par l'équation suivante [42] :

$$I_t = I_i(\lambda) \times e^{\alpha(\lambda) \times d} \quad (\text{I.10})$$

Avec :

$I_i(\lambda)$: l'intensité incidente.

$I_t(\lambda)$: l'intensité transmise.

λ : la longueur d'onde.

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

Dans des études menées par Singh et al. [49] et Trainor et al. [50], les coefficients d'absorption suivants ont été rapportés : $1 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ pour le GaN et $5 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ pour l'InN. Ces valeurs indiquent la capacité de chaque matériau à absorber la lumière incidente. Un coefficient d'absorption plus élevé signifie que le matériau est plus efficace pour absorber les photons et convertir leur énergie en porteurs de charge.

Dans une étude réalisée par Hori et al. [51], les variations des coefficients d'absorption dans l'alliage InGaN ont été examinées pour différentes compositions d'indium, comme illustré sur la figure I.10. Il a été démontré que l'alliage InGaN présente un coefficient d'absorption (d'environ 10^5 cm^{-1}) dix fois plus élevé que celui du silicium monocristallin, selon les résultats des études antérieures. Cela met en évidence la capacité de l'alliage InGaN à absorber efficacement la lumière incidente, ce qui en fait un matériau prometteur pour les applications optoélectroniques.

Les données fournies par ces auteurs pour l'ensemble de la gamme de compositions correspondent au modèle d'absorption suivant :

$$\alpha(E) = \alpha_0 \times \frac{\sqrt{E-E_g}}{E} \quad (I.11)$$

Avec :

$\alpha(E)$: le coefficient d'absorption de l'alliage.

E : l'énergie des photons [eV].

E_g : le gap [eV].

α_0 : le paramètre d'ajustement [$eV^{1/2}/cm^{-1}$]; La valeur moyenne de α_0 déduit à partir de ces études est de $5 \times 10^5 eV^{1/2}/cm^{-1}$.

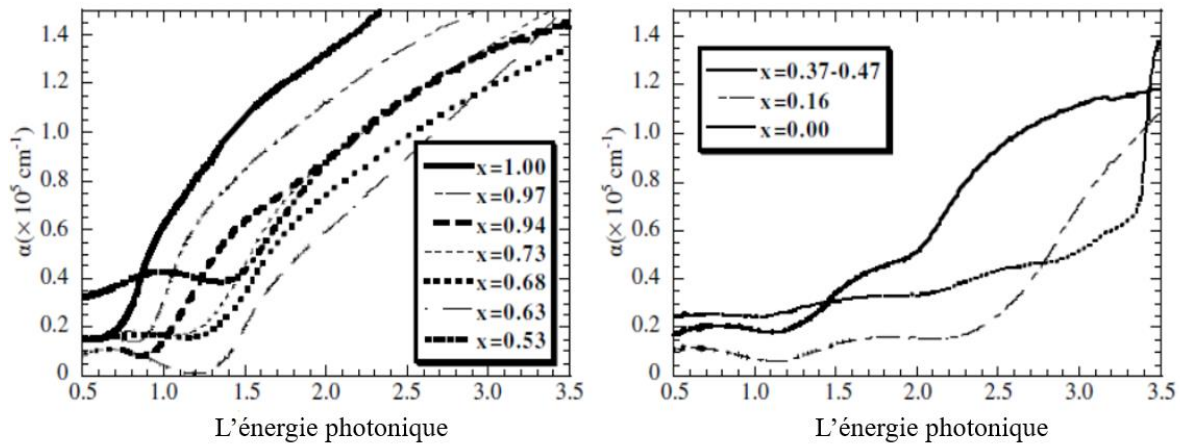


Figure I.10 : Courbes d'absorption de couches d'InGaN avec différentes compositions d'indium :
a) Hautes concentrations d'indium. b) Faibles concentrations d'indium [51].

Les recherches ont démontré que l'alliage InGaN présente d'excellentes propriétés d'absorption de la lumière, ce qui en fait un choix supérieur par rapport au silicium (gap indirect) ou à d'autres semi-conducteurs (gap direct) pour la fabrication de cellules solaires à couche mince. Par exemple, à une longueur d'onde de 500 nm, seulement 100 nm d' $In_{0.3}Ga_{0.7}N$ sont nécessaires pour absorber 90 % de l'intensité lumineuse, tandis que 1 μm de silicium cristallin serait nécessaire. [42].

I.6.3 Le gap d'émission

Lorsqu'on observe expérimentalement un pic caractéristique au gap d'émission optique d'un matériau, cela peut être une indication de sa bonne qualité structurale et morphologique. En effet, le pic est dû à la recombinaison de porteurs de charge dans le matériau, et plus

précisément à la recombinaison entre électrons et trous au niveau du gap d'énergie. Les électrons passent alors de l'état excité à l'état fondamental en émettant de la lumière.

Deux techniques couramment utilisées pour mesurer le gap d'émission optique sont la photoluminescence (PL) et la cathodoluminescence (CL). La PL consiste à exciter le matériau avec une source lumineuse, généralement un laser, et à mesurer la lumière émise à des longueurs d'ondes données. La CL, quant à elle, utilise un faisceau d'électrons pour exciter le matériau et mesurer la lumière émise. Ces techniques permettent de caractériser les propriétés optiques du matériau et de déterminer notamment le gap d'émission optique.

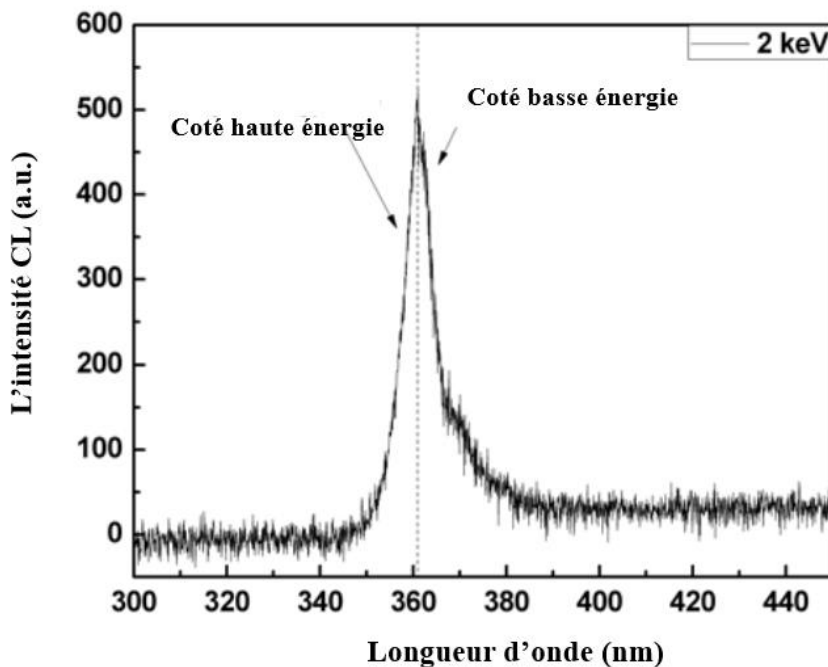


Figure I.11: Analyse du spectre de cathodoluminescence (CL) à température ambiante d'un pseudo-substrat de GaN-ULDN mesuré à 2 keV révélant l'asymétrie du gap d'émission optique [42].

La figure 1.11 représente le spectre de cathodoluminescence (CL) mesuré à température ambiante pour un pseudo-substrat de GaN. On observe que le pic d'émission n'est pas symétrique, ce qui est typique pour les matériaux semi-conducteurs. Le comportement de la luminescence peut être décrit de la manière suivante :

- La partie du spectre située à haute énergie (courtes longueurs d'onde) correspond à l'émission des états proches du bord de la bande, à une distance de quelques KT (où KT représente le produit de la constante de Boltzmann et de la température).

Cette émission (E_{NBE}) peut être décrite par l'équation de Maxwell [42] :

$$E_{NBE} = A_0 \times \exp - \left(\frac{E - E_g}{KT} \right) \quad (I.12)$$

Avec :

A_0 : constante.

E et E_g : l'énergie des photons et du gap [eV].

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

T : la température.

- La partie du spectre à basse énergie correspond aux inhomogénéités présentes dans la bande interdite, telles que les défauts et les dopages. Cette émission peut être modélisée par l'équation suivante :

$$E_{NBE} = B_0 \times \sqrt{E - E_g} \times \exp - \left(\frac{E - E_g}{KT} \right) \quad (I.13)$$

Avec :

B_0 : une constante.

La longueur d'onde correspondant au maximum du pic d'émission ne reflète pas exactement la position du gap d'énergie. En réalité, c'est la longueur d'onde correspondant au point d'inflexion du côté basse énergie du spectre qui donne une estimation plus précise de la bande interdite. Cependant, dans le cas où l'émission est intense, comme c'est généralement le cas pour les nitrures, la différence entre le maximum du pic et le point d'inflexion est négligeable. De plus, il est possible de calculer le déplacement du gap d'émission de l'alliage InGaN lié à la contrainte dans toute la gamme de composition, en accord avec les résultats de Parker et al. [52] selon :

$$\Delta E_{NBE} = E_{NBE}^{Relaxe} - E_{NBE}^{contraint} \quad (I.14)$$

Sachant que la contrainte dans le plan peut être exprimée par une équation de la forme [53] :

$$\varepsilon_{xx} = \frac{a_{InGaNC} - a_{InGaNR}}{a_{InGaNR}} \approx 0 \times 11 \times x \quad (I.15)$$

Où : $a_{InGaNC} = a_{GaN}$

$$a_{\text{InGaNR}} = x \times a_{\text{InN}} + (1 - x) \times a_{\text{GaN}} \quad (\text{I.16})$$

La variation du gap d'émission avec la composition est discutée dans la référence [52] selon l'équation suivante :

$$\Delta E_{\text{NBE}} = 1.56 \times x - 0.6244 \times x^2 \quad (\text{I.17})$$

I.7 L'élaboration de l' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

La croissance des nitrures d'éléments III, notamment l' InGaN , est réalisable à l'aide de deux techniques d'épitaxie: l'épitaxie en phase vapeur aux organométalliques (MOVPE) et l'épitaxie par jet moléculaire (MBE). L'épitaxie par jet moléculaire, également connue sous le nom de MBE (Molecular Beam Epitaxy), est une technique de croissance réalisée sous ultravide. Elle implique l'évaporation sous vide de matériaux sources solides chauffés à haute température, qui se déposent sur un substrat maintenu à une température inférieure (700-750°C) et mis en rotation pour assurer l'homogénéité des couches déposées. Bien que la technique MBE offre une meilleure qualité cristalline, elle présente une croissance beaucoup plus lente. La figure I.12 illustre le schéma général d'un système MBE utilisé pour la croissance de GaN. C'est pourquoi la technique MOVPE est largement préférée pour la croissance des semi-conducteurs III-V en raison de la bonne reproductibilité et des fortes vitesses de croissance accessibles.

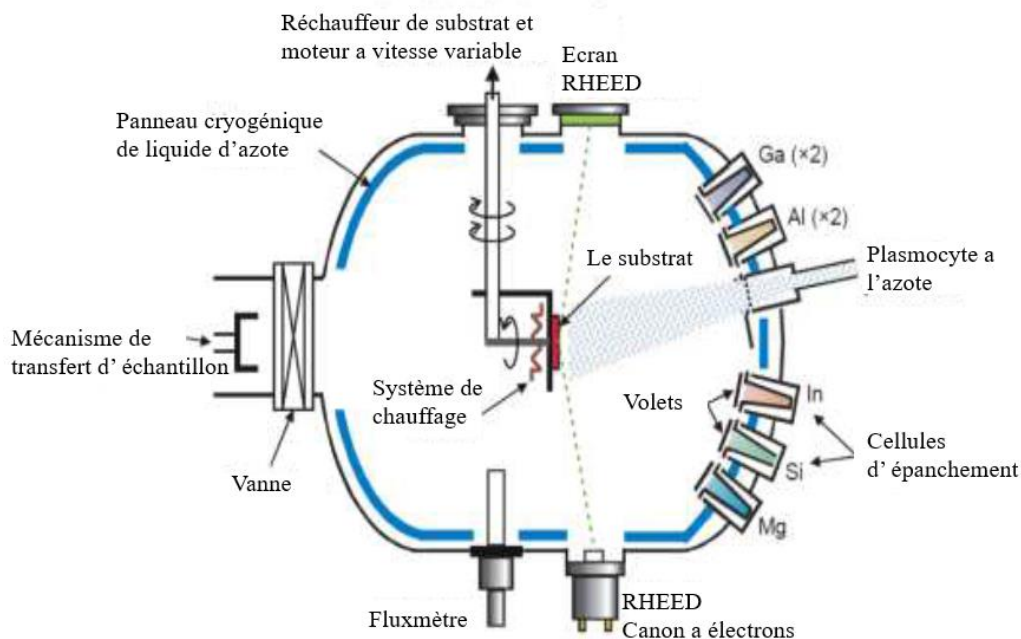


Figure I.12: Schéma synoptique d'un système d'épitaxie par jet moléculaire (MBE) [54].

Cette méthode implique le dépôt de composés épitaxiaux, tels que le GaN, sur un substrat à l'aide d'un gaz vecteur et d'une source organométallique. Pour les composés contenant du gallium, le triméthylgallium ($\text{Ga}(\text{CH}_3)_3$) est souvent utilisé comme source organométallique, tandis que l'hydrogène est utilisé comme gaz vecteur [55]. La figure I.13 présente la chambre de croissance de la croissance par MOVPE de type T.

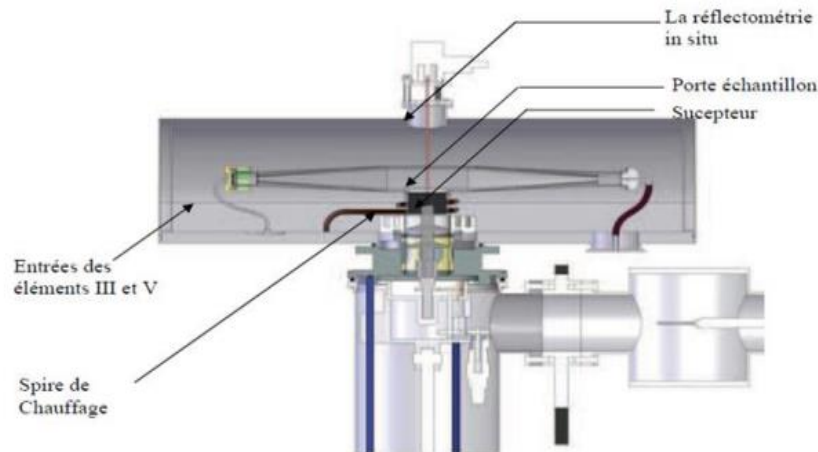


Figure I.13: Coupe de la chambre de croissance de la croissance par MOVPE de type T au sein du LMOPS [56].

I.7.1 Le substrat pour l'hétéroépitaxie

La fabrication de couches de l'InGaN représente un défi majeur pour le développement de cellules solaires à base de ce matériau. Actuellement, il est extrêmement difficile de produire une couche de l'InGaN épaisse en une seule fois, ce qui conduit à son dépôt sous forme de films minces sur un substrat. Cependant, l'InGaN présente un problème d'accord de maille avec les substrats couramment disponibles pour l'épitaxie. Afin de résoudre ce problème, une couche tampon est utilisée pour adapter les paramètres du substrat à ceux de la couche de l'InGaN déposée. Les substrats traditionnellement utilisés sont le saphir (Al_2O_3) et le carbure de silicium (SiC), avec une couche tampon de GaN ou d'AlN [57, 58].

Le nitrure d'aluminium (AlN) a également été étudié comme substrat pour la croissance de l'InGaN. Cependant, la fabrication de couches épaisses d'AlN reste très difficile. De plus, d'autres substrats tels que le silicium [59] ou le verre pourraient être utilisés pour les composants à base d'InGaN, malgré leur structure très différente, en raison de leur faible coût et de leurs nombreuses applications [19].

Ces substrats présentent des paramètres de maille et des coefficients d'expansion thermique différents de ceux de la couche tampon de GaN, ce qui entraîne une densité élevée de défauts structuraux, principalement des dislocations. Ces défauts ont un impact significatif sur les performances d'une cellule solaire [42].

I.7.2 L'épaisseur critique

Lorsqu'on a une croissance par épitaxie d'un matériau sur un substrat, avec un faible désaccord entre les paramètres de maille du matériau et du substrat, il se produit un phénomène appelé "épaisseur critique". Au-delà de cette épaisseur critique, la contrainte accumulée dans la couche devient excessive, ce qui conduit à la relaxation de la couche afin de réduire l'énergie stockée. Lorsque l'épaisseur de la couche épitaxie est inférieure à l'épaisseur critique, la couche se déforme élastiquement pour s'adapter au paramètre de maille du substrat (on parle alors d'épitaxie pseudomorphe). En revanche, lorsque l'épaisseur de la couche épitaxie dépasse l'épaisseur critique, la couche se relaxe. Ceci est dû à l'accumulation d'une énergie élastique trop importante, ce qui provoque la formation de dislocations dans le matériau, tandis que la couche reprend ses paramètres de maille initiaux [60]. La détermination de l'épaisseur critique de relaxation (h_c) de l'InGaN sur le GaN en fonction de la composition d'indium a fait l'objet de diverses études, mettant en évidence une forte dépendance entre l'épaisseur critique et le désaccord de maille entre la couche épitaxie et son substrat [61]. Cependant, il est important de noter qu'il existe une grande disparité dans les mesures de l'épaisseur critique en raison des différentes méthodes de croissance, conditions expérimentales et modèles théoriques utilisés.

I.7.3 Les défauts structuraux

La progression de l'industrie des composants à base de nitrures est entravée par la présence fréquente d'une grande densité de défauts structuraux dans les couches épitaxies. Ces défauts structuraux peuvent être classés en deux catégories principales : les défauts ponctuels et les défauts étendus [62]. Les défauts ponctuels comprennent des anomalies au niveau des atomes individuels, tels que les lacunes (emplacements vides dans la structure cristalline), les anti-sites (atomes d'une espèce chimique présents à la place d'atomes d'une autre espèce), les impuretés par substitution (atomes étrangers remplaçant les atomes du matériau) et les défauts interstitiels (atomes supplémentaires insérés dans les espaces interstitiels de la structure cristalline). Les défauts étendus, quant à eux, sont principalement des dislocations, qui se

forment en raison du désaccord de maille entre le matériau épitaxie et le substrat. Les dislocations sont des défauts linéaires qui résultent de la déformation et de la relaxation des contraintes causées par le désaccord de maille. Elles peuvent se propager à travers le matériau épitaxie et affecter sa structure cristalline sur une plus grande échelle.

Lyons et al. [63] ont mené des études qui ont permis de décrire les propriétés des différents types de défauts présents dans le matériau GaN, tels que les lacunes, les défauts interstitiels et les anti-sites, ainsi que l'interaction entre ces défauts et les impuretés. Dans leurs travaux, la Figure I.14 représente les courbes d'énergie de formation des différents défauts en fonction du niveau de Fermi, dans des conditions de croissance riches en gallium.

Le niveau de Fermi à 0 eV correspond au sommet de la bande de valence (conditions de dopage P élevé), tandis que le niveau de Fermi à 3,42 eV (gap du GaN) correspond à la base de la bande de conduction (conditions de dopage N élevé). Les résultats indiquent que les lacunes d'azote (V_N) sont présentes de manière statistique dans le GaN, tandis que les lacunes de gallium sont plutôt présentes dans le cas d'un dopage P.

En plus des défauts ponctuels, la croissance du matériau GaN conduit à une forte concentration de dislocations, en raison de l'utilisation de substrats présentant un fort désaccord de maille.

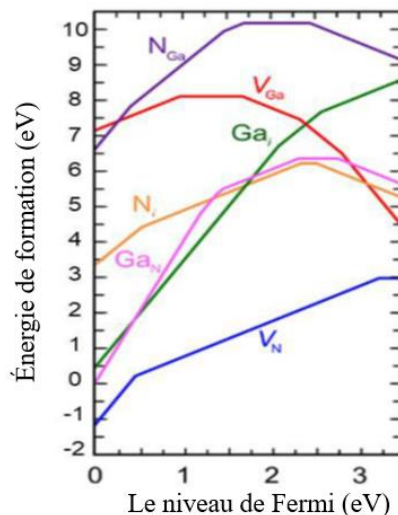


Figure I.14: Energie de formation des défauts natifs dans GaN sous conditions riches en azote en fonction du niveau de Fermi. $E_F = 0$ correspond au maximum de la bande de valence [63].

Des recherches ont été menées par Janotti et al. [64] sur le matériau binaire InN. Leurs travaux ont révélé la présence de lacunes d'azote (V_N) dans InN, tout comme dans le binaire

GaN, avec une prédominance de ces défauts dans les couches InN de type P. Les autres défauts tels que les lacunes d'indium, les interstitiels et les anti-sites ont des énergies de formation plus élevées et sont donc moins favorables dans InN. La Figure I.15 représente les courbes d'énergie de formation des différents défauts en fonction du niveau de Fermi, dans des conditions de croissance riches en indium.

Dans une autre étude réalisée par Feng-Qi et al. [65], les énergies de formation des défauts ponctuels dans InN de type wurtzite ont été calculées en tenant compte de différentes conditions de croissance. Les résultats ont montré que dans des conditions riches en azote, ce sont les atomes d'azote interstitiels qui sont les plus favorables, tandis que dans des conditions riches en indium, les lacunes d'azote (V_N) présentent des énergies de formation beaucoup plus faibles que les autres défauts.

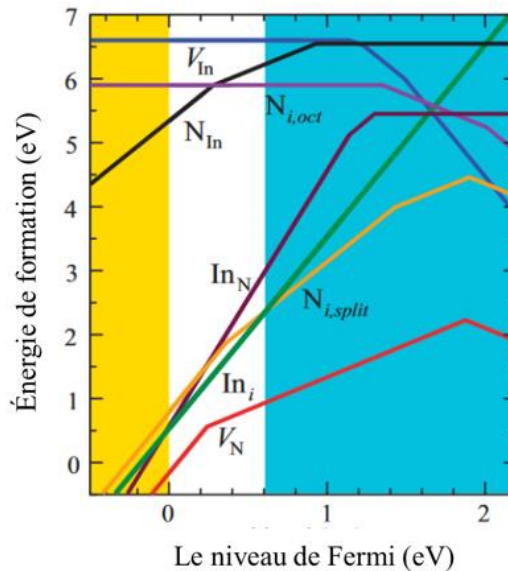


Figure I.15: Energie de formation des défauts natifs dans InN sous conditions riches en indium en fonction du niveau de Fermi. $E_F = 0$ correspond au maximum de la bande de valence [64].

I.7.4 Le dopage

Le dopage est une méthode qui implique l'ajout de petites quantités d'impuretés à un matériau dans le but de modifier ses propriétés physiques, telles que sa structure, ses caractéristiques électroniques et optiques. En général, le dopage est réalisé de trois manières différentes: la diffusion, l'implantation ionique et la transmutation nucléaire. Toutefois, lorsqu'il s'agit de composants semi-conducteurs produits par dépôt chimique en phase vapeur, la méthode de dopage par diffusion est la plus couramment utilisée et la plus appropriée.

Presque tous les composants électroniques, y compris les cellules solaires, reposent sur une jonction entre une couche de semi-conducteur de type P et une couche de semi-conducteur de type N (jonction PN). Ainsi, il est essentiel d'obtenir de bons dopages de type N et P pour garantir des dispositifs efficaces. Les recherches sur les nitrides tels que GaN, InN et InGaN ont révélé une concentration élevée d'électrons, généralement de l'ordre de 10^{18} cm^{-3} , conférant un caractère intrinsèquement de type N [4,66]. Cette caractéristique est attribuée aux défauts structuraux, en particulier aux lacunes d'azote, qui sont considérées comme la principale source d'électrons dans InN, ayant la plus faible énergie de formation dans le GaN et l'InN [67]. De plus, il est supposé que des impuretés telles que l'oxygène, le carbone, etc., provenant des processus de croissance, contribuent également au caractère de type N [4,67-69]. Des travaux réalisés par Schaff et ses collègues [66] ont démontré que la concentration d'électrons dans InN dépend de l'épaisseur de la couche. En effet, la concentration d'électrons suit la densité de défauts résultant des incompatibilités de structure, ce qui diminue à mesure que l'épaisseur des couches augmente. En raison de cette caractéristique intrinsèque de type N observée dans les nitrides du groupe III (III-N), le dopage de type N est relativement facile à obtenir, tandis que le dopage de type P est plus complexe à réaliser.

a) Dopage de type N

Le dopage de type N dans les nitrides est souvent réalisé en utilisant du silicium. Le silicium présente une solubilité d'environ 10^{20} cm^{-3} dans le GaN, par exemple, ce qui le rend adapté au dopage des nitrides, et le dopage de type N du GaN est actuellement bien maîtrisé. L'énergie d'activation précise du silicium n'est pas déterminée, mais elle est généralement estimée entre 10 et 30 meV. Ce type de dopage consiste à introduire un excès d'électrons qui portent une charge négative. Le dopage des ternaires InGaN est relativement facile, car les nitrides ont intrinsèquement un caractère de type N. Le dopant le plus couramment utilisé est le silicium, et sa concentration dans les couches de nitride est généralement d'environ 10^{18} cm^{-3} [26].

En plus du silicium, il existe d'autres éléments qui peuvent être utilisés comme dopants de type N, tels que l'oxygène, l'hydrogène [70] et le germanium [71]. Cependant, il est important de noter que ces dopants alternatifs sont généralement moins efficaces que le silicium. L'une des raisons est qu'ils ont tendance à créer une densité plus élevée de défauts dans le matériau dopé. Ces défauts peuvent inclure des lacunes ou des sites d'impuretés qui altèrent la structure cristalline du matériau. Cette augmentation de la densité de défauts peut entraîner une

compensation plus importante du dopage, ce qui signifie que l'effet attendu du dopage de type N est réduit. En conséquence, le silicium est généralement préféré en tant que dopant de type N en raison de sa solubilité élevée et de sa capacité à minimiser la densité de défauts, ce qui permet d'obtenir des performances plus efficaces dans les dispositifs semi-conducteurs.

b) Dopage de type P

Le dopage de type P reste un défi majeur dans le développement des nitrures. Étant donné le caractère intrinsèquement de type N des nitrures tels que InN, GaN et InGaN, il est nécessaire de compenser d'abord les électrons en excès présents dans le matériau avant de parvenir à créer un excès de trous [72]. Le dopage de type P est généralement réalisé en incorporant du magnésium (Mg) en tant qu'accepteur, ce qui nécessite un processus complexe d'activation à haute température. Les résultats expérimentaux montrent une limite à l'incorporation du Mg d'environ quelques 10^{19} cm^{-3} dans le GaN hexagonal, avec une concentration de trous plus faible en raison de l'énergie d'activation élevée des impuretés de magnésium. Au-delà de cette limite, la morphologie du matériau se dégrade [73].

Dans le cas des nitrures ternaires InGaN, le dopage de type P présente des difficultés. Cela est dû au fait que les nitrures ont intrinsèquement un caractère de type N. L'un des problèmes couramment rencontrés est la création de défauts de compensation lors du dopage. En d'autres termes, lorsqu'un dopant de type P est introduit dans le réseau, un défaut de type N se forme à proximité, annulant ainsi l'effet du dopant de type P initial. Cette interaction entre les dopants et les défauts de compensation constitue un défi majeur dans la réalisation du dopage de type P efficace dans les nitrures [74].

I.8 Le nitrure de gallium-indium InGaN

Le nitrure de gallium-indium (InGaN) est un composé semi-conducteur formé par la combinaison de trois éléments de la colonne III, à savoir le gallium (Ga), l'indium (In) et l'azote (N) de la colonne V. Il s'agit d'un matériau ternaire qui fait partie des nitrures d'éléments III, résultant de la combinaison des matériaux binaires GaN et InN. La première synthèse de l'alliage ternaire InGaN a été réalisée en 1972 par Osamura et al. [75] en utilisant la technique du plasma à rayon d'électrons sur des substrats de saphir et de quartz. Au fil des années, la croissance de l'alliage InGaN a été progressivement maîtrisée, avec des avancées significatives, notamment dans les années 2000. Depuis lors, cet alliage est devenu un domaine de recherche très prometteur, notamment dans le domaine de la photovoltaïque.

L'alliage ternaire InGaN a récemment suscité un vif intérêt dans le domaine de l'optoélectronique en raison de ses remarquables propriétés optiques et électriques. Sur le plan optique, il présente une conductivité thermique élevée, un coefficient d'absorption important et une bande interdite directe qui couvre une large plage allant de l'infrarouge à l'ultraviolet. En théorie, la largeur de la bande interdite de cet alliage peut varier entre 0,67 et 3,4 eV. En ce qui concerne ses propriétés électriques, l'alliage présente de faibles masses effectives et une mobilité relativement élevée des porteurs de charge. Ces caractéristiques revêtent une importance capitale pour la fabrication de dispositifs optoélectroniques tels que les diodes électroluminescentes (LED), les cellules solaires et les lasers [76].

La loi de Végard est fréquemment utilisée pour estimer certaines propriétés de l'alliage ternaire InGaN en prenant en compte les caractéristiques des composés binaires qui le composent. Cette approche permet d'approximer les propriétés de l'alliage en interpolant linéairement les valeurs des propriétés des binaires en fonction de leur proportion respective. Ainsi, la loi de Végard est un outil pratique pour estimer des propriétés telles que la bande interdite, les paramètres de maille et d'autres caractéristiques de l'alliage InGaN. Cependant, il est important de noter que cette loi repose sur des approximations et ne prend pas en compte certains effets spécifiques à l'alliage ternaire. Par conséquent, il est souvent nécessaire de combiner les estimations basées sur la loi de Végard avec des données expérimentales et des simulations plus avancées pour obtenir une description plus précise des propriétés de l'alliage InGaN.

I.9 Les différentes applications de l' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ dans l'optoélectronique

En examinant les propriétés fondamentales de l'alliage InGaN, nous pouvons tirer des conclusions sur ses domaines d'application et ses performances potentielles. Avec son large gap direct et sa large gamme spectrale, ce matériau se positionne comme un candidat prometteur pour des composants à haut rendement capables de résister à des températures élevées et de gérer de fortes puissances [77]. Cela en fait notamment un choix intéressant pour la fabrication de diodes et de dispositifs photovoltaïques. L'alliage InGaN couvre désormais quasiment tout le spectre visible du soleil, comme illustré dans la figure I.16, montrant la variation de la bande interdite de l'alliage InGaN en fonction de la concentration d'indium:

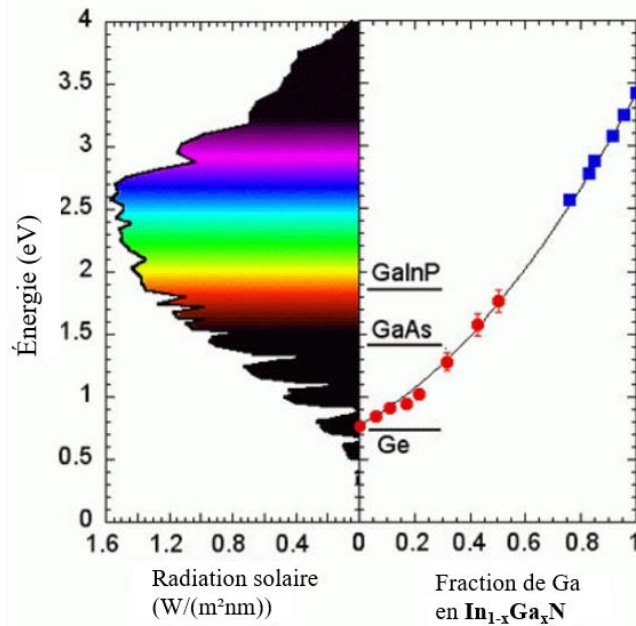


Figure I.16: Les énergies de bande interdite du système d'alliage InGaN couvrent l'ensemble du spectre solaire [14].

I.9.1 Les diodes électroluminescentes

Les diodes électroluminescentes se positionnent actuellement comme une solution technologique très prometteuse. Leurs avantages en termes d'efficacité énergétique sont considérables, avec une consommation bien inférieure à celle des ampoules à incandescence traditionnelles, ainsi qu'une durée de vie nettement plus longue. De plus, elles bénéficient d'un fort potentiel de développement pour les années à venir.

Parmi les semi-conducteurs, on trouve principalement le nitrure de gallium (GaN) et le nitrure d'indium (InN), qui présentent respectivement un gap énergétique de 3,4 eV et de 0,9 eV. L'alliage ternaire nitrure de gallium-indium (InGaN) permet de couvrir l'ensemble des valeurs de gap entre 3,4 eV et 0,9 eV. Actuellement, il est considéré comme le matériau le plus prometteur pour la fabrication de diodes électroluminescentes blanches. Le nitrure d'indium et de gallium est utilisé comme couche électroluminescente dans les diodes électroluminescentes (LED) bleues et vertes modernes. Les LEDs bleues à base d'InGaN atteignent aujourd'hui des rendements très élevés. En recouvrant ces LEDs bleues avec un phosphore convertissant la lumière bleue en jaune ou en orange, il est possible de fabriquer des sources de lumière blanche d'une efficacité inégalée.

Obtenir une émission de lumière à des longueurs d'onde élevées (jaune-rouge) requiert l'utilisation d'alliages InGaN à forte teneur en indium, ce qui constitue encore un défi en termes de qualité structurale et optique de ces matériaux.

I.9.2 Les cellules solaires

L'idée d'utiliser l'alliage InGaN dans la fabrication de cellules solaires a été proposée par J. Wu [78] dans son étude intitulée "Superior Radiation Resistance of InGaN Alloys: Full-Solar-Spectrum Photovoltaic Material" en 2003. Cette étude mettait en évidence les caractéristiques particulières de l'InGaN, notamment sa capacité à moduler son gap et sa résistance aux radiations. Depuis lors, de nombreuses recherches se sont concentrées sur ce type de matériau. L'utilisation de l'alliage InGaN dans la fabrication de cellules photovoltaïques présente un fort potentiel. Les recherches théoriques menées dans ce domaine ont donné des résultats très prometteurs, que ce soit pour les cellules multijonctions, les hétérojonctions ou les homojonctions. L'avantage principal de cet alliage réside dans sa capacité à moduler son gap sur pratiquement tout le spectre solaire. De nombreuses études ont été menées sur diverses structures de cellules solaires utilisant l'alliage InGaN. Dans la suite, nous examinerons l'intérêt de cet alliage pour les cellules solaires en mettant en évidence les résultats obtenus par de nombreuses recherches.

Conclusion

Dans ce premier chapitre, nous avons abordé les différents aspects des matériaux nitrides des éléments III. Nous avons commencé par retracer l'histoire des nitrides, en soulignant leur évolution et leur importance dans le domaine des semi-conducteurs. Ensuite, nous avons discuté des concepts fondamentaux liés aux composés binaires, ternaires et quaternaires des semi-conducteurs III-V. Nous avons exploré les différentes combinaisons possibles de ces éléments et leurs propriétés caractéristiques. Nous avons ensuite approfondi l'étude des propriétés du matériau InGaN. Nous avons examiné ses propriétés structurales, électriques, électroniques et optiques. Nous nous sommes intéressés notamment à l'élaboration des nitrides, en mettant l'accent sur le nitride de gallium-indium. Enfin, nous avons souligné l'importance de l'alliage InGaN dans le développement de nouveaux composants électroniques et optoélectroniques, en particulier dans les domaines des diodes et des cellules solaires. Nous avons mis en évidence les avantages et les applications potentielles de cet alliage dans ces domaines.

Références du chapitre I :

- [1] K-J. Hsiao, "Dissertation electron-reflector stragry for CdTe thin film solar cells", thèse de doctorat, université d'Etat du Colorado Fort Collins, Colorado, 2010.
- [2] W. Shockley et H. J. Queisser, « Detailed Balance Limit of Efficiency of p-n Junction Solar Cells », p. 11, 2016.
- [3] M. A. Green, E. D. Dunlop, D. H. Levi, J. Hohl-Ebinger, M. Yoshita, et A. W. Y. Ho-Baillie, "Solar cell efficiency tables (version 54) ", Prog Photovolt Res Appl, vol. 27, no 7, p. 565 575. 2019, doi: 10.1002/pip.3171.
- [4] Wu, Junqiao. "When group-III nitrides go infrared: new properties and perspectives", Journal of Applied Physics. 2009, Vol. 106, 011101.
- [5] Mohamed Mimoune, "Études des capteurs photovoltaïques basés sur les nanotechnologies", thèse de doctorat 2016, Université de Québec à Trois-Rivières.
- [6] H. P. Maruska, "The preparation and properties of vapor-deposited single-crystal-line GaN," Appl. Phys. Lett., vol. 15, no. 10, p. 327, 1969.
- [7] I.Akasaki, H. Amano, N. Koide, M. Kotaki, and K. Manabe, "Conductivity control of GaN and fabrication of UV/blue GaN light emitting devices," Physica B:Condensed Matter, vol. 185, pp. 428-432, 1993.
- [8] Isamu Akasaki, "Key inventions in the history of nitride-based blue LED and LD".Journal of Crystal Growth 300 (2007) 2–10.
- [9] S. Nakamura, T. Mukai, and M. Senoh, "In situ monitoring and Hall measurements of GaN grown with GaN buffer layers", J. Appl. Phys., vol. 71, no. 11, p. 5543, 1992.
- [10] T. Suemitsu, H. Yokoyama, T. Ishii, T. Enoki, G. Meneghesso, and E. Zanoni, "30-nm two-step recess gate InP-Based InAlAs/InGaAs HEMTs". Electron Devices, IEEE Transactions on, vol. 49, pp. 1694 – 1700, Oct. 2002.
- [11] K. Kunihiro, K. Kasahara, Y. Takahashi, and Y. Ohno, "Experimental evaluation of impact ionization coefficients in GaN", Electron Device Letters, IEEE, vol. 20, pp. 608 –610, Dec. 1999.
- [12] V. Y. Davydov, A. A. Klochikhin, R. P. Seisyan, and V. V Emtsev, "Rapid Research Note Absorption and Emission of Hexagonal InN.Evidence of Narrow Fundamental Band Gap" Phys. Stat. Solidi (b),vol. 229, no. 3, pp. R1–R3, 2002.
- [13] J. Wu, W. Walukiewicz, K. M. Yu, J. W. Ager, E. E. Haller, H. Lu, and W. J. Schaff, "Small band gap bowing in $In_{1-x}Ga_xN$ alloys ".Appl.Phys. Lett. vol. 80, no. 25, p. 4741, 2002.
- [14] Von Roedern, Bolko, and Alan E. Delahoy. "Photovoltaic Cell and Module Technologies." Photovoltaic Cell and Module Technologies 6651 (2007).
- [15] Zhang Z-H, Tiam Tan S, Kyaw Z, Liu W, Ji Y, Ju Z, et al. "p-doping-free InGaN/GaN light-emitting diode driven by three-dimensional hole gas". Applied Physics Letters. 2013; 103:263501.
- [16] Macho Anani, Christian Mathieu, Mohammed Khadraoui, Zouaoui Chama, Sara Lebid, YoucefAmar, "High-grade efficiency III-nitrides semiconductor solar cell", 2009.
- [17] Mathilde Billaud, Thomas Ernst, Thierry Baron, Hervé Boutray, "Intégration de semi-conducteurs III-V sur substrat silicium pour les transistors n-MOSFET à haute mobilité", 2017.
- [18] Johnson, W.C., Parson, J.B. and Crew, M.C. "Nitrogen Compounds of Gallium-III". Journal of Physical Chemistry. 1932, Vol. 36, 2651.
- [19] Vanessa 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,May 2012. 29
- [20] Takayuki Yanagida, Yutaka Fujimoto, Noriaki Kawaguchi and Satoko Yanagida, "Dosimeter properties of AlN" Journal of the Ceramic Society of Japan 121 [12] 988-991 2013.
- [21] N. Baron, "Optimisation de l'épitaxie sous jets moléculaires d'hétérostructures à base de GaN: application aux transistors à haute mobilité d'électrons sur substrat silicium". Thèse de doctorat, Université Nice Sophia Antipolis, Sept. 2009.
- [22] Henini, Mohamed, and M. Razeghi. "Optoelectronic Devices: III Nitrides". Elsevier, 2004.
- [23] Liou, B. T., Yen, S. H., & Kuo, Y. K. (2005, January). "Vegard's law deviation in band gaps and bowing parameters of the wurtzite III-nitride ternary alloys". In Semiconductor Lasers and Applications II (Vol. 5628, pp. 296-305). SPIE.
- [24] S. Pereira, M. R. Correia, E. Pereira, K. P. O'Donnell, E. Alves, A. D. Sequeira,N. Franco, I. M.Watson, and C. J. Deatcher. "Strain and composition distributions in wurtzite InGaN/GaN layers extracted fromx-ray reciprocal spacemapping". Applied physics letters, 80(21):3913–3915, 2002. 19, 123
- [25] F. Bernardini, V. Fiorentini, and D. Vanderbilt. "Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides". Physical Review B, 56:R10024–R10027, Oct 1997.
- [26] Tanakorn Wonglakhon and Dirk Zahn "Interaction potentials for modelling GaN precipitation and solid state polymorphism" 2020 J. Phys.: Condens. Matter 32 205401.

- [27] A. Dussaigne, "Diodes électroluminescentes blanches monolithiques", thèse de doctorat, Université de Nice-Sophia Antipolis, 2005.
- [28] Wright, A.F. and Nelson, J.S. "Explicit treatment of the gallium 3d electrons in GaN using the plane-wave pseudopotential method". *Physical Review B*. 1994, Vol. 50, 2159.
- [29] SAKR, Salam. "Dispositifs inter sous bandes à base de nitrures d'éléments III du proche infrarouge au THz ". 2012. Thèse de doctorat. Paris 11.
- [30] S. Mokkalapati and C. Jagadish. "III-V compound SC for optoelectronic devices". *Materials Today*, 12(4):22 – 32, 2009.
- [31] I. Vurgaftman and J. R. Meyer. "Band parameters for nitrogen-containing semiconductors". *Journal of Applied Physics*, 94(6):3675–3696, 2003.
- [32] F. Bernardini and V. Fiorentini. "Nonlinear Behavior of Spontaneous and Piezoelectric Polarization in III-V Nitride Alloys". *physica status solidi (a)*, 190(1) :65–73, 2002.
- [33] Vincenzo Fiorentini, Fabio Bernardini, and Oliver Ambacher. "Evidence for nonlinear macroscopic polarization in III–V nitride alloy heterostructures". *Applied Physics Letters*, 80(7):1204–1206, 2002.
- [34] E. T. Yu and O. Manasresh. Chapitre de livre "Inclusion in III-V Nitride Semiconductors ": Application and Devices. Université de California a Sandiego la Jolla, CA 92093-0407.
- [35] K. Shimada, T. Sota, and K. Suzuki. "First-principles study on electronic and elastic properties of BN, AlN, and GaN ". *Journal of Applied Physics*, 84(9):4951–4958, 1998.
- [36] A. Polian, M. Grimsditch, and I. Grzegory. "Elastic constants of gallium nitride". *Journal of Applied Physics*, 79(6):3343–3344, 1996.
- [37] Sheleg, A. U., and V. A. Savastenko. "Determination of elastic constants of hexagonal crystals from measured values of dynamic atomic displacements" .*Inorganic Materials* 15.1 (1979): 1257-1260.
- [38] A. F. Wright. "Elastic properties of zinc-blende and wurtzite AlN, GaN, and InN ". *Journal of Applied Physics*, 82(6):2833–2839, 1997.
- [39] V. Yu. Davydov, Yu. E. Kitaev, I. N. Goncharuk, A. N. Smirnov, J. Graul, O. Semchinova, D. Uffmann, M. B. Smirnov, A. P. Mirgorodsky, and R. A. Evarestov. "Phonon dispersion and Raman scattering in hexagonal GaN and AlN ". *Physical Review B*, 58:12899–12907, Nov 1998.
- [40] K. Kim, W. R. L. Lambrecht, and B. Segall. "Elastic constants and related properties of tetrahedrally bonded BN, AlN, GaN, and InN ". *Physical Review B*, 53:16310–16326, Jun 1996.
- [41] Morkoç, Hadis. "Handbook of nitride semiconductors and devices, Materials Properties", Physics and Growth. John Wiley & Sons, 2009.
- [42] Youssef El Gmili. "Étude et caractérisations par cathodoluminescence de couches minces d'InGaN pour le photovoltaïque". Thèse de doctorat, Université de Lorraine, 2013. Français.NNT : 2013LORR0228.
- [43] Brown, G. F., et al. "Finite element simulations of compositionally graded InGaN solar cells." *Solar Energy Materials and Solar Cells* 94.3 (2010): 478-483.
- [44] Yacine Marouf, "Modélisation des cellules solaires en InGaN en utilisant Atlas Silvaco", mémoire de magister, université de Mohamed Khider – Biskra-Algérie 2013.
- [45] R. R. Pelá, C. Caetano, M. Marques, L. G. Ferreira, J. Furthmüller et al. "Accurate band gaps of AlGa_xN, InGa_xN, and AlIn_xN alloys calculations based on LDA-1/2 approach", *Applied physics letters*, 2011
- [46] GaN-Gallium nitride. Electronic archive. New Semiconductor Materials. Characteristics and Properties. Ioffe Physico-Technical Institutue.
- [47] InN - Indium Nitride. New Semiconductor Materials. Characteristics and properties. Ioffe Physico-Technical Institute.
- [48] M. Anani et al. "In_xGa_{1-x}N refractive index calculations ". *Microelectronics Journal*. 2007, Vol. 38, 262.
- [49] R. Singh, D. Doppalapudi, T. D. Moustakas et L. T. Romano. "Phase separation in InGa_xN thick films and formation of InGa_xN/GaN double heterostructures in the entire alloy composition". *Applied Physics Letters*, 70(9):1089–1091, 1997.
- [50] J. W. Trainor et K. Rose. "Some properties of InN films prepared by reactive evaporation". *Journal of Electronic Materials*, 3:821–828, 1974.
- [51] M. Hori, K. Kano, T. Yamaguchi, Y. Saito, T. Araki, Y. Nanishi, N. Teraguchi et A. Suzuki. "Optical Properties of In_xGa_{1-x}N with Entire Alloy Composition on InN Buffer Layer Grown by RF-MBE". *Physica Status Solidi (b)*, 234(3):750–754, 2002.
- [52] C. A. Parker, J. C. Roberts, S. M. Bedair, M. J. Reed, S. X. Liu, N. A. El-Masry, and L. H. Robins. "Optical band gap dependence on composition and thickness of In_xGa_{1-x}N (0 < x < 0.25) grown on GaN ". *Applied Physics Letters*, 75(17):2566–2568, 1999.
- [53] E. A. Berkman. "Growth and Fabrication of GaN and In_xGa_{1-x}N Based Optoelectronic Devices". Thèse de doctorat, Université d'État de Caroline du Nord, 2008.
- [54] F. Guillot, "Développement de nanostructures à base de semi-conducteurs III Nitrures pour l'optoélectronique infrarouge", Université Joseph Fourier Grenoble I, 2007

- [55] J.Y. Duboz. "Matériaux semi-conducteurs à grand gap III-V à base de GaN ". Ed. Techniques Ingénieur. 1999.
- [56] S. Gautier, C. Sartel, S. Oul-Saad, J. Martin, A. Sirenko, and A. Ougazzaden. "GaN materials growth in new design reactor using DMHY and NH₃". Journal of Crystal Growth. 2006.10.064.2006.
- [57] A. M. Fischer, Y. O. Wei, F. A. Ponce, M. Moseley, B. Gunning, and W. A. Doolittle. "Highly luminescent, high-indium-content InGa_N film with uniform composition and full misfit-strain relaxation". Applied Physics Letters, 103(13):131101, 2013.
- [58] Chloe A.M. Fabien, Brendan P. Gunning, W. Alan Doolittle, Alec M. Fischer, Yong O. Wei, Hongen Xie, and Fernando A. Ponce. "Low-temperature growth of InGa_N films over the entire composition range by MBE". Journal of Crystal Growth, 425:115–118, September 2015. 00002. 28, 82, 96
- [59] Aseev, Pavel, et al. "Near-infrared emitting In-rich InGa_N layers grown directly on Si: Towards the whole composition range." Applied Physics Letters 106.7 (2015).
- [60] Kwiseon Kim, Walter RL Lambrecht, and Benjamin Segall. "Elastic constants and related properties of tetrahedrally bonded BN, AlN, GaN, and InN ". Physical Review B, 53(24):16310, 1996.
- [61] J. W. Matthews and A. E. Blakeslee. "Defects in epitaxial multilayers: I. Misfit dislocations". Journal of Crystal Growth, 27:118–125, 1974. 30
- [62] Yam, Fong Kwong, et al. "Gallium nitride: an overview of structural defects." Optoelectronics-Materials and Techniques 4 (2011): 99-136.
- [63] J. L. Lyons et C. G. Van de Walle. "Computationally predicted energies and properties of defects in GaN ". NPJ Computational Materials, 3:1, 2017.
- [64] A. Janotti, J. L. Lyons, and C. G. Van de Walle. "Hybrid functional calculations of native point defects in InN ". physica status solidi (a), 209(1) :65–70, January 2012.
- [65] F. Zhao, J. Shi, et M. Yang, "First-Principles Study on Native Defect Complexes in InN ". Communications in Theoretical Physics, 53(1):145, 2010.
- [66] Ager III, J.W., et al. "Mg-doped InN and InGa_N–Photoluminescence, capacitance–voltage and thermopower measurements." physica status solidi (b) 245.5 (2008): 873-877.
- [67] J. Neugebauer, et C. G. Van de Walle. "Atomic geometry and electronic structure of native defects in GaN ". Physical Review B. 1994, Vol. 50, 8067.
- [68] I. Gorczyca, A. Svane et N.E. Christensen, "Theory of point defects in GaN, AlN, and BN: Relaxation and pressure effects". Physical Review B. 1999, Vol. 60, 8147.
- [69] C. Stampfl et al. "Native defects and impurities in InN: First principles studies using the local-density approximation and self-interaction and relaxation-corrected pseudopotentials". Physical Review B. 2000, Vol. 61, 7846.
- [70] Janotti, Anderson, and Chris G. Van de Walle. "Sources of unintentional conductivity in InN." Applied Physics Letters 92.3 (2008).
- [71] Walukiewicz, W. "Intrinsic limitations to the doping of wide-gap semiconductors." Physica B: Condensed Matter 302 (2001): 123-134.
- [72] S. Hautakangas, J. Oila, M. Alatalo, K. Saarinen, L. Liskay, D. Seghier, et H. P. Gislason. "Vacancy defects as compensating centers in Mg-doped GaN". Physical review letters, 90(13):137402, 2003.
- [73] Ph. Agnès. "Caractérisation électrique et optique du nitrure de gallium hexagonal et cubique en vue de l'obtention d'émetteurs bleus". Thèse de doctorat, Lyon INSA, 1999.
- [74] Hageman, P.R., et al. "N-type doping of wurtzite GaN with germanium grown with Plasma assisted molecular beam epitaxy". Journal of Crystal Growth. 2004.
- [75] K. Osamura et al. "Fundamental absorption edge in GaN, InN and their alloys". Solid State Communications. 1972, 617.
- [76] E. Matioli, C. Neufeld, M. Iza, S. C. Cruz, A. A. Al-Heji, X. Chen, R. M. Farrell, S. Keller, S. DenBaars, U. Mishra, S. Nakamura, J. Speck, and C. Weisbuch. "High internal and external quantum efficiency InGa_N/Ga_N solar cells". Applied Physics Letters 2011.
- [77] Zhang Y, Liu Y, Wang ZL. "Fundamental theory of piezotronics". Advanced Materials. 2011; 23:3004-13.
- [78] WU, J., WALUKIEWICZ, W., YU, K. M., et al. "Superior radiation resistance of In_{1-x}Ga_xN alloys: Full-solar-spectrum photovoltaic material system". Journal of Applied Physics, 2003, vol. 94, no 10, p. 6477-6482.

Chapitre II

Cellules photovoltaïques à base d'InGaN

II.1 Introduction

L'épuisement des ressources naturelles, et la nécessité de protéger l'environnement ont conduit à un processus dynamique de transition énergétique à l'échelle mondiale. Cette transition vise à remplacer progressivement notre système énergétique actuel, qui dépend largement des énergies non renouvelables, par un système principalement alimenté par des sources d'énergie renouvelables. Parmi ces sources d'énergie renouvelables, l'énergie solaire photovoltaïque a connu une croissance remarquable ces dernières années. Cette technologie permet de convertir directement la lumière du soleil en électricité utilisable [1]. Elle offre une solution extrêmement pratique pour générer de l'électricité n'importe où, que ce soit à grande échelle dans de vastes parcs solaires ou à petite échelle dans des installations autonomes isolées.

Initialement, la filière photovoltaïque s'est développée principalement grâce à l'industrie spatiale, qui utilisait cette technologie pour alimenter les satellites en orbite. Cependant, au fil du temps, elle s'est démocratisée et a été largement adoptée par les particuliers et les entreprises, qui installent désormais des panneaux solaires sur les toits des bâtiments. L'énergie photovoltaïque est considérée comme une solution prometteuse pour la production d'électricité, elle devient l'une des principales sources d'énergie alternatives pour l'avenir, offrant un moyen durable de produire de l'électricité sans épuiser les ressources naturelles et en réduisant les émissions de gaz à effet de serre. Néanmoins, le domaine de l'énergie solaire photovoltaïque est largement dominé par l'utilisation du silicium, qui présente encore des inconvénients tels qu'un rendement relativement faible et un coût élevé. De plus, les cellules solaires à simple jonction en silicium atteignent leur limite supérieure en termes d'efficacité théorique maximale, plafonnée à environ 26,7 % [2]. Afin de maximiser l'exploitation de l'énergie solaire, des efforts considérables sont actuellement consacrés à la recherche, à l'optimisation et à la mise en œuvre de systèmes photovoltaïques plus performants. À cet égard, de nombreuses études se concentrent sur l'utilisation de nouvelles structures, telles que les nanostructures, ainsi que sur l'exploration de matériaux innovants, notamment les nitrures des éléments III.

Ces avancées visent à améliorer le coefficient d'absorption des spectres lumineux par les cellules solaires, ce qui permettrait d'obtenir des rendements plus élevés tout en maintenant un coût relativement bas. En explorant de nouveaux matériaux et en exploitant des structures à l'échelle nanométrique, les chercheurs espèrent développer des technologies photovoltaïques plus efficaces et économiquement viables. Ces efforts de recherche visent à repousser les limites

actuelles de l'efficacité énergétique des systèmes photovoltaïques et à ouvrir la voie à une utilisation plus répandue de l'énergie solaire en tant que source d'énergie propre et renouvelable.

Le nitrure de gallium-indium, en raison de sa large bande interdite qui dépend de la concentration de l'indium, offre un fort potentiel pour les applications photovoltaïques à haut rendement. Dans ce contexte, des progrès significatifs ont été réalisés dans la création d'une cellule solaire à base d'InGaN à l'échelle nanométrique, permettant d'atteindre un rendement optimal. Cette avancée représente une contribution majeure dans le domaine de la recherche en énergie solaire.

Dans ce chapitre, nous commençons par fournir une description des cellules photovoltaïques, en abordant leur principe de fonctionnement, l'effet photovoltaïque et le schéma électrique équivalent d'une cellule solaire. Ensuite, nous abordons les caractéristiques électriques des cellules photovoltaïques, en mettant l'accent sur les différentes cellules solaires basées sur le nitrure de gallium-indium. Enfin, nous examinons les avantages et les défis liés à l'utilisation du nitrure de gallium-indium pour les cellules photovoltaïques, ainsi que l'objectif de ce travail de recherche.

II.2 Les cellules solaires photovoltaïques

En 1839, le physicien français Edmond Becquerel fit une découverte majeure en observant qu'il était possible d'obtenir une petite quantité d'électricité à partir de certains matériaux lorsqu'ils étaient exposés à la lumière. Le phénomène responsable de cette conversion d'énergie lumineuse en énergie électrique fut expliqué par Albert Einstein en 1905, ce qui lui valut le prix Nobel de Physique en 1921. Cependant, ce n'est qu'en 1954 que la première cellule photovoltaïque (PV) fut mise au point par des chercheurs du laboratoire Bell aux États-Unis. Cette cellule PV pionnière utilisait du silicium comme matériau et affichait un rendement de 4,5 % [3].

Une cellule photovoltaïque, également appelée cellule solaire, est un dispositif électronique qui convertit directement la lumière du soleil en électricité par effet photovoltaïque [4]. Lorsque la lumière solaire frappe la cellule, elle génère à la fois du courant électrique et de la tension, permettant ainsi la production d'énergie électrique. Pour générer de l'électricité à partir de la lumière, un matériau absorbant est utilisé pour transférer les électrons vers un niveau d'énergie plus élevé. Ces électrons sont ensuite déplacés de la cellule solaire vers un circuit externe. Une fois dans ce circuit, les électrons libèrent leur énergie et retournent dans la cellule solaire. Les semi-conducteurs, tels que les jonctions p-n, sont largement utilisés dans ce processus de conversion solaire.

La configuration illustrée dans la figure II.1 présente l'architecture classique d'une cellule photovoltaïque. On y observe la présence d'une jonction PN, d'une couche antireflet et d'électrodes positionnées sur les surfaces avant et arrière.

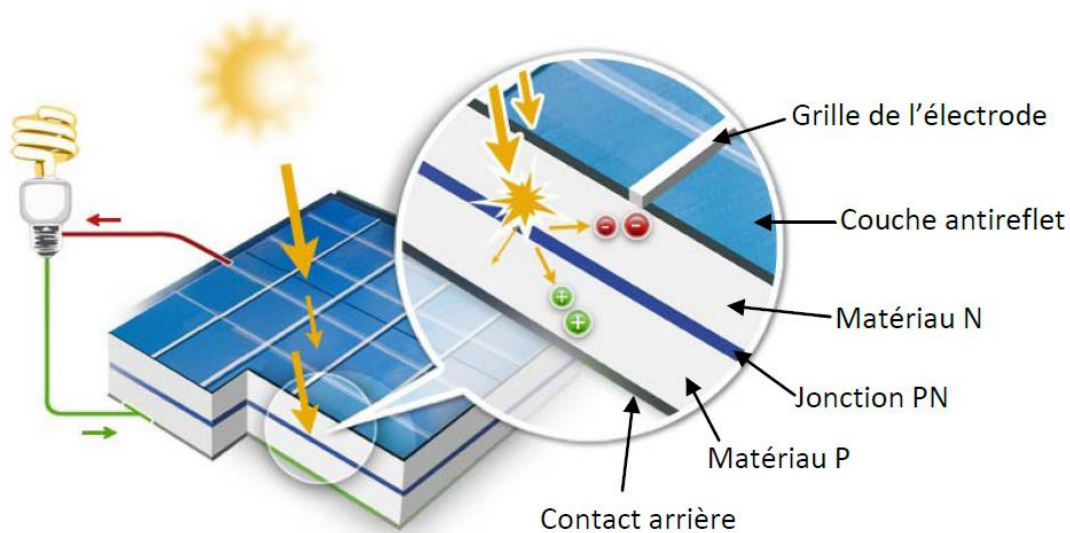


Figure II.1 : Illustration d'une configuration de cellule photovoltaïque [5].

La cellule photovoltaïque est composée essentiellement d'une ou plusieurs couches actives entourées par des électrodes. Son fonctionnement repose sur la photo-excitation, c'est-à-dire l'excitation et le transport des charges vers les électrodes. Chaque couche doit satisfaire certaines conditions. Tout d'abord, il est nécessaire que la lumière incidente ne soit pas absorbée par les couches initiales avant d'atteindre la couche active. La structure de la cellule solaire comprend les éléments suivants : une grille collectrice avant, une couche dopée N, une couche dopée P, une couche conductrice arrière.

La configuration la plus basique d'une cellule photovoltaïque consiste en une jonction entre deux zones dopées différemment, soit dans le même matériau (homojonction), soit entre deux matériaux distincts (hétérojonction). L'objectif de cette structure photovoltaïque est de générer un champ électrique interne. Les applications classiques des cellules solaires incluent l'alimentation des satellites, les systèmes de pompage d'eau, les stations de communication, l'éclairage public et les calculatrices.

II.2.1 Le principe de fonctionnement

Les cellules solaires ont pour fonction de convertir directement l'énergie lumineuse (rayonnement électromagnétique provenant du soleil) en électricité en utilisant le phénomène photovoltaïque. Les matériaux dopés de type N et de type P sont caractérisés par un excès de porteurs libres : des électrons pour le matériau de type N et des trous pour le matériau de type P. Une cellule photovoltaïque repose sur une jonction PN, qui correspond à la mise en contact d'un matériau de type P avec un matériau de type N. Si ces matériaux sont composés du même matériau, on parle d'une homojonction, tandis que s'ils sont constitués de matériaux différents, on parle d'une hétérojonction. Le principe de fonctionnement d'une cellule solaire est illustré dans la Figure II.2 et se déroule en trois étapes :

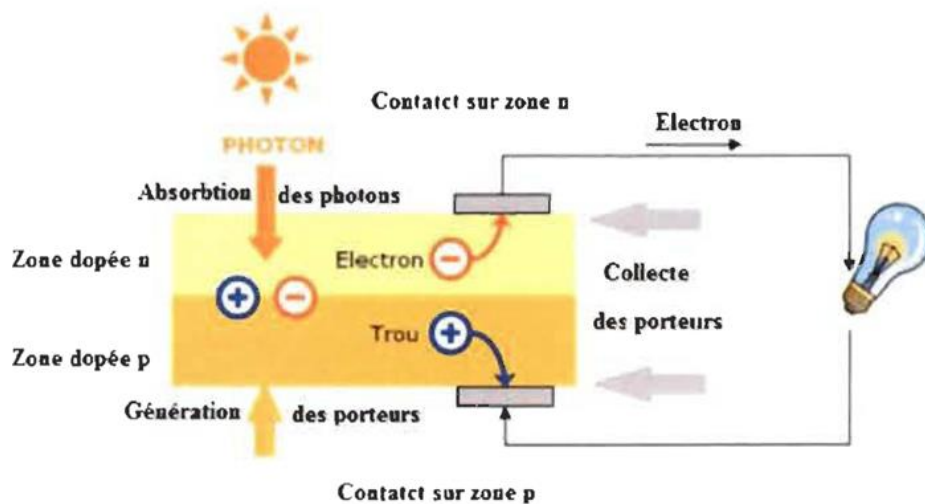


Figure II.2 : Schéma du principe de fonctionnement d'une cellule solaire [6].

- ✓ Lorsqu'un matériau semi-conducteur est exposé à la lumière, les photons sont absorbés en raison de la différence d'énergie entre les bandes de valence et de conduction. C'est d'ailleurs l'une des caractéristiques fondamentales des semi-conducteurs. L'absorption de la lumière provoque une transition des électrons du matériau absorbant de l'état fondamental à un état excité.
- ✓ Dans la région n ou p d'une cellule solaire, les porteurs minoritaires (électrons dans la couche p et trous dans la couche n) qui parviennent à la zone de jonction sont redirigés par un champ électrique vers la couche appropriée, soit la zone p pour les trous, soit la zone n pour les électrons. L'accumulation de ces porteurs permet de générer un courant de diffusion photo-induit. Lorsqu'il s'agit de deux semi-conducteurs différents, cela permet de recueillir les charges générées dans le matériau [7].

- ✓ Lors de la conversion de l'énergie des photons en énergie électrique, au niveau de la zone de jonction, les paires électron/trou résultant de l'interaction des photons seront séparées par le champ électrique. Les électrons se déplaceront vers la région N tandis que les trous se déplaceront vers la région P (voir figure II.3). Cette séparation des charges générées permet de générer un courant photo-induit, également appelé courant de génération. [8]

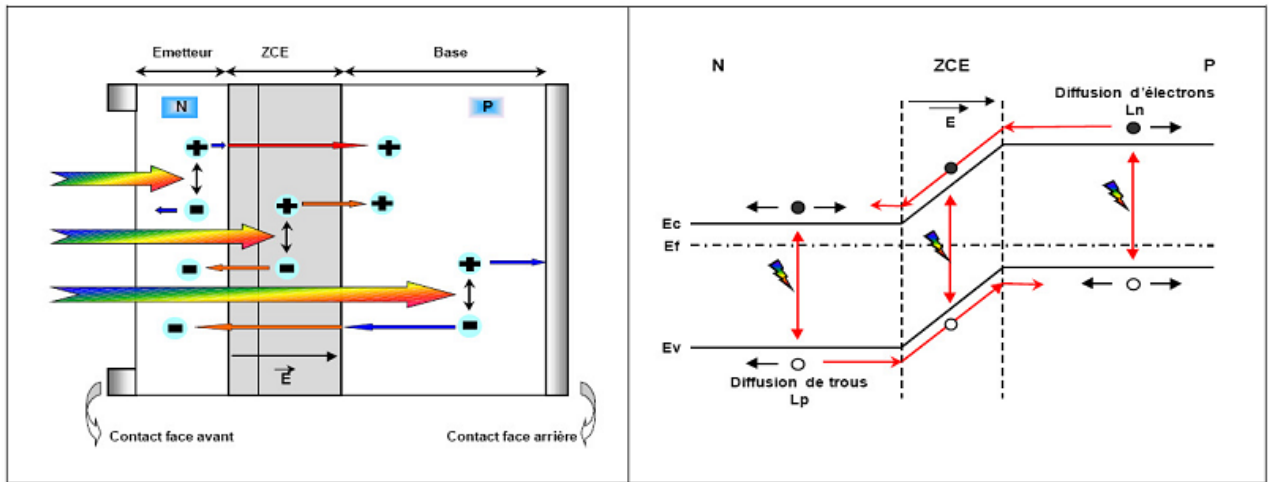


Figure II.3 : La structure et le diagramme de bande d'une cellule photovoltaïque [9].

II.2.2 L'effet photovoltaïque

Le processus physique connu sous le nom de "photovoltaïque" consiste à convertir l'énergie lumineuse en énergie électrique en transférant l'énergie des photons aux électrons d'un matériau semi-conducteur. L'effet photovoltaïque est donc un phénomène résultant de la conversion de la lumière en électricité, basé sur l'interaction entre la lumière et la matière dans les semi-conducteurs. Cela implique la transformation directe d'une énergie électromagnétique (rayonnement) en énergie électrique continue utilisable. L'énergie lumineuse est transportée par des particules appelées photons. Lorsque la lumière est absorbée par un matériau, certains de ses électrons peuvent recevoir l'énergie des photons. Chaque photon est associé à une longueur d'onde λ , où [10]:

$$E_{ph} = h \times \nu = \frac{h \times c}{\lambda} \quad (II.1)$$

Où :

h : la constante de Planck $\approx 6.626.10^{-34}$ J.s.

c : la vitesse de la lumière $\approx 2,998.10^8$ m/s.

ν : la fréquence associée à la longueur d'onde.

Dans la majorité des dispositifs photovoltaïques, le matériau responsable de l'absorption des photons est un semi-conducteur. À l'intérieur de ce matériau, il existe une plage d'énergie interdite, également connue sous le nom de "bande interdite" ou "gap", qui sépare deux zones où les niveaux d'énergie possibles sont distribués de manière continue : la bande de valence avec un niveau d'énergie le plus élevé (EV), et la bande de conduction avec un niveau d'énergie le plus bas (EC).

Le fonctionnement de base repose sur l'interaction entre la lumière et la matière dans les semi-conducteurs. Lorsqu'un matériau semi-conducteur est exposé à la lumière, les photons ayant une énergie égale ou supérieure à la largeur de la bande interdite sont absorbés, ce qui crée des paires électron-trou en déplaçant les électrons de la bande de valence (VB) vers la bande de conduction (CB). Si ces paires électron-trou ne sont pas séparées, elles se recombinent rapidement en libérant un phonon correspondant à l'énergie absorbée, ainsi qu'un photon.

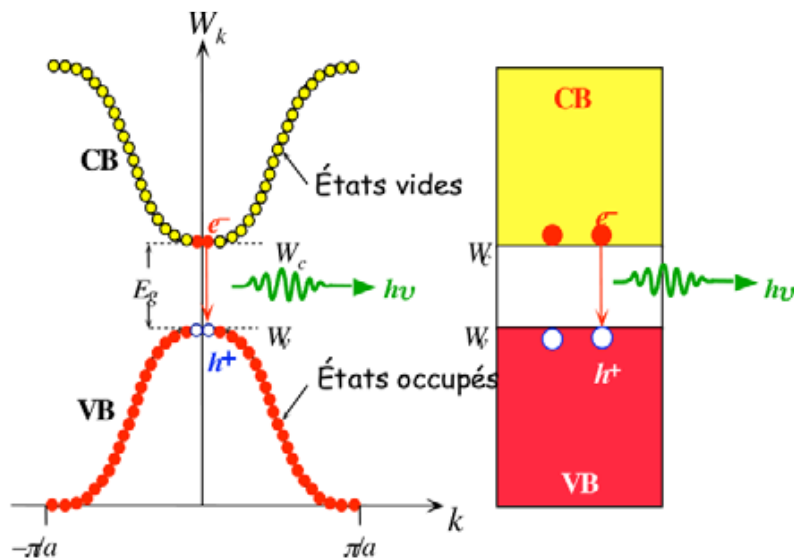


Figure II.4 : Effet photovoltaïque [11].

Pour les semi-conducteurs, lorsqu'un photon atteint un matériau, deux situations peuvent se présenter :

- ✓ Si l'énergie du photon est inférieure à l'énergie de la bande interdite (E_g), le matériau sera transparent à ce photon.
- ✓ Si l'énergie du photon est égale ou supérieure à E_g , il sera absorbé, ce qui générera une paire électron-trou.

La Figure II.4 illustre le principe de l'effet photovoltaïque dans les semi-conducteurs. Les photons ayant une énergie bien plus élevée que ' E_g ' entraînent un excès d'énergie pour les électrons, se manifestant sous forme de chaleur, ce que l'on appelle la thermalisation. Cela signifie que toute l'énergie du photon absorbé n'est pas totalement convertie en énergie électrique. Pour remédier à cette problématique, un concept consiste à empiler plusieurs jonctions p-n ayant des valeurs différentes de ' E_g ' (multi-jonctions). Cela permet de maximiser la conversion de l'énergie optique en énergie électrique, comme le montre la Figure II.5.

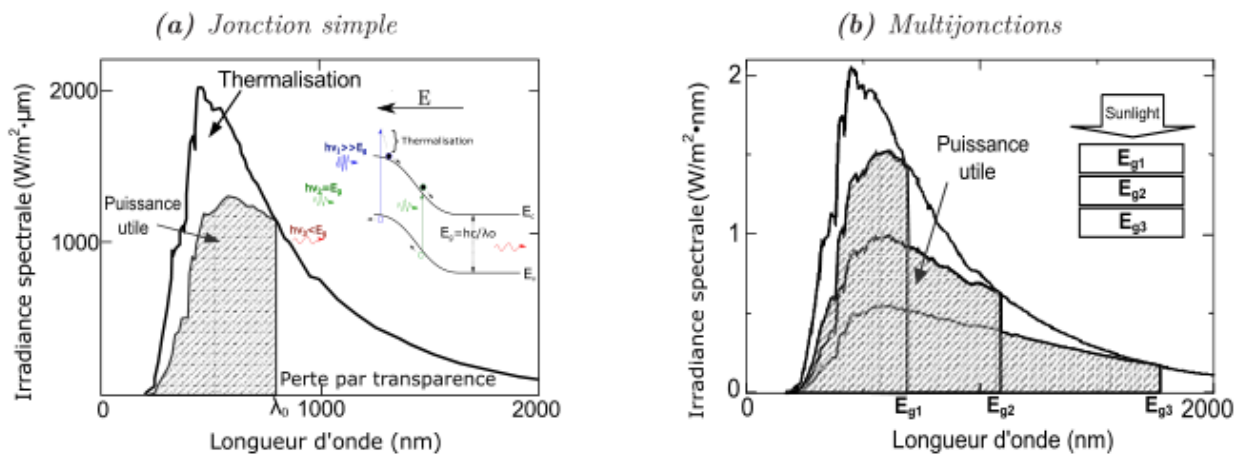


Figure II.5 : Effet photovoltaïque dans (a) une jonction p-n simple et (b) multi-jonctions [12].

II.2.3 Le schéma électrique équivalent d'une cellule solaire

D'un point de vue électrique, la cellule solaire peut être représentée par un circuit équivalent qui décrit son comportement. Ce circuit est connu sous le nom de circuit équivalent. La figure II.6 schématise la cellule solaire réelle en proposant un modèle électrique de la cellule photovoltaïque. Ce modèle comprend un générateur de courant I_{ph} , qui représente le courant photogénéré s'opposant au courant d'obscurité I_D de la diode polarisée en direct. On y trouve également les résistances R_s et R_{sh} .

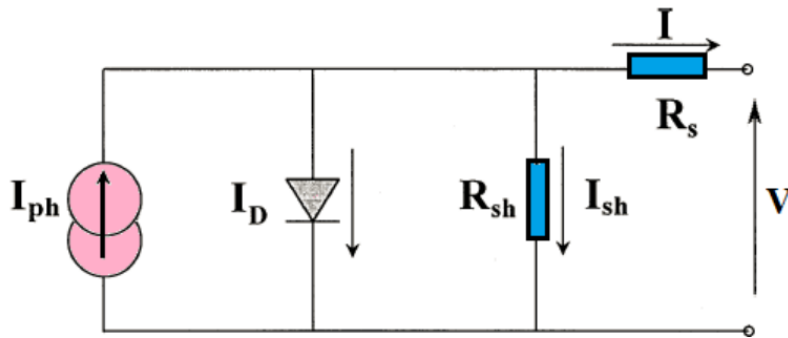


Figure II.6 : Schéma électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque réelle [12].

La résistance série, notée R_s , est causée par la résistivité des différentes couches de la cellule photovoltaïque, telles que l'émetteur, la base et les contacts métalliques (en particulier leur interface avec le semi-conducteur). Idéalement, cette résistance devrait être aussi faible que possible afin de limiter son impact sur le courant de la cellule. Cela peut être réalisé en réduisant la résistivité du matériau utilisé.

La résistance shunt, représentée par R_{sh} , est associée à un courant de fuite qui circule en parallèle à travers l'émetteur, généralement causé par un défaut. Cela peut se produire lorsque la diffusion des contacts métalliques à haute température endommage l'émetteur ou en cas de court-circuit sur les bords de la cellule. L'objectif est de maximiser cette résistance shunt, c'est-à-dire de la rendre aussi élevée que possible [13].

II.3 Les caractéristiques électriques $I(V)$ d'une cellule solaire

La relation entre le courant et la tension d'une cellule solaire est représentée par une courbe appelée caractéristique courant-tension, qui est accompagnée d'un schéma électrique équivalent. Cette courbe $I(V)$ fournit des informations importantes sur les paramètres clés de la cellule solaire tels que son rendement, les différentes résistances parasites et le facteur de forme. On mesure le courant en fonction de la tension appliquée dans des conditions d'obscurité et d'ensoleillement, et la présence de lumière entraîne un décalage de la courbe $I(V)$.

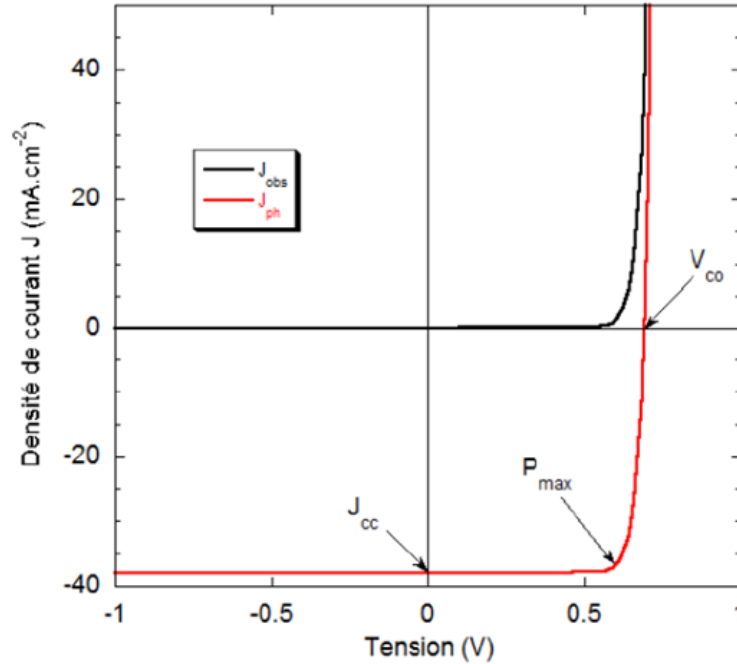


Figure II.7 : Caractéristique $I(V)$ d'une cellule photovoltaïque à l'obscurité (noir) et sous éclaircment AM1.5 [14].

La caractéristique d'une cellule en l'absence de lumière est similaire à celle d'une diode. La figure II.7 illustre les courbes courant-tension de la cellule solaire à l'obscurité (représentée en noir) et sous illumination (représentée en rouge). On peut observer que la courbe sous illumination est simplement décalée par rapport à celle sans lumière, d'une valeur I_{cc} , qui indique la génération constante de courant par la lumière. Ce courant est appelé courant de court-circuit car il représente le courant généré par la cellule sous lumière lorsque la tension est nulle. La valeur V_{co} , en revanche, correspond à la tension de circuit ouvert. Elle représente l'équilibre entre le courant généré par la lumière et le courant en l'absence de lumière [15].

La caractéristique $I(V)$ correspond à la soustraction de la photo courant et du courant de la diode à l'obscurité par [15]:

$$I(V) = I_{\text{obs}} - I_{\text{ph}} = I_0 \times e^{\frac{q \times V}{k \times T}} - I_{\text{ph}} \quad (\text{II.2})$$

Avec :

I_{obs} : la densité de courant d'obscurité.

I_{ph} : la densité de courant photogénéré.

I_0 : le courant de saturation de la diode.

q : la charge élémentaire.

K : la constante de Boltzmann.

T : la température.

II.4 Les paramètres électriques d'une cellule photovoltaïque

La caractéristique courant-tension d'une cellule photovoltaïque fournit des informations cruciales sur ses performances. Elle permet d'extraire plusieurs paramètres clés qui permettent d'évaluer la cellule tel que le courant du court-circuit (I_{cc}), la tension en circuit ouvert (V_{co}), le facteur de forme (FF), le rendement de la cellule (η) et par la suite la réponse spectrale d'une cellule photovoltaïque R_s [16].

II.4.1 Le courant de court circuit (I_{cc})

Le courant de court-circuit d'une cellule photovoltaïque est le courant qui circule à travers la cellule lorsque ses bornes sont court-circuitées et qu'elle est exposée à un éclairage lumineux. Ce courant est mesuré en milliampères (mA). Le courant de court-circuit augmente de manière linéaire avec l'intensité d'illumination de la cellule. Plus l'éclairage est intense, plus le courant de court-circuit sera élevé. Plusieurs facteurs influencent le courant de court-circuit. Tout d'abord, la surface éclairée de la cellule joue un rôle important. Une plus grande surface exposée à la lumière permettra à davantage de photons d'être absorbés, ce qui augmentera le courant de court-circuit, la longueur d'onde du rayonnement lumineux est également un facteur déterminant, la mobilité des porteurs de charges, c'est-à-dire la facilité avec laquelle les électrons et les trous se déplacent à travers le matériau de la cellule, la température joue un rôle dans la génération du courant de court-circuit. En général, une augmentation de la température entraîne une diminution de la mobilité des porteurs de charges, ce qui peut réduire le courant de court-circuit [4].

Le courant de court-circuit est un paramètre essentiel qui indique la quantité de courant électrique pouvant être générée par une cellule photovoltaïque lorsqu'elle est court-circuitée sous éclairage.

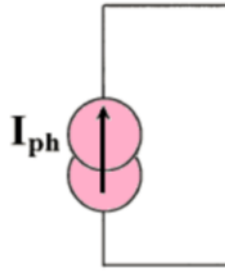


Figure II.8 : le courant de court-circuit ($V=0$)

Le courant de court-circuit est :

$$I_{cc} = I_{ph} - I_0 \times \left[e^{\frac{R_s \times I_{cc}}{V_T}} - 1 \right] - \frac{R_s \times I_{cc}}{R_p} \quad (II.3)$$

Avec :

$V_T = \frac{K \times T}{q}$: le potentiel thermodynamique.

I_0 : le courant de saturation.

R_s : la résistance en série

R_p : la résistance en parallèle.

Pour la plupart des modules photovoltaïques, qui ont une faible résistance, et dans des conditions d'éclairement normales, le terme suivant peut être négligé $I_0 \times \left[e^{\frac{R_s \times I_{cc}}{V_T}} - 1 \right]$ devant I_{ph} (Courant photonique de la diode). L'expression approximative du courant de court-circuit peut être formulée comme suit :

$$I_{cc} = I_{ph} - \frac{R_s \times I_{cc}}{R_p} \quad (II.4)$$

En situation idéale (avec une résistance série R_s nulle et une résistance parallèle R_p infinie), le courant de court-circuit (I_{cc}) est équivalent au photocourant.

II.4.2 La tension de circuit ouvert (V_{co})

La tension de circuit ouvert, notée V_{co} et exprimée en volts (V), est la tension maximale mesurée aux bornes d'une cellule lorsque aucun courant ne circule à travers celle-ci ($I = 0$). Elle est principalement influencée par la température de la cellule et le spectre de l'éclairement auquel

elle est exposée. La tension de circuit ouvert reflète la polarisation directe de la cellule photovoltaïque, c'est-à-dire la polarisation de la jonction induite par le courant généré par la lumière incidente. Mathématiquement, elle peut être déterminée en utilisant l'équation suivante [17] :

$$I = 0 = I_{cc} - I_0 \times (e^{\frac{V_{co}}{V_T}} - 1) \quad (II.5)$$

La tension de circuit ouvert est donnée par [18]:

$$V_{co} = V_T \times \ln\left(1 + \frac{I_{cc}}{I_0}\right) \quad (II.6)$$

La valeur de la tension de circuit ouvert (V_{co}) est influencée par le rapport entre le courant de court-circuit (I_{cc}) et le courant de saturation inverse (I_0), selon une relation logarithmique. Il est important de noter que le courant de court-circuit varie presque linéairement avec l'irradiance, ce qui signifie que l'effet de l'irradiance est plus prononcé sur I_{cc} que sur V_{co} . Par conséquent, les variations d'irradiance auront un impact plus significatif sur I_{cc} que sur V_{co} . En outre, il a été démontré que la tension de circuit ouvert est indépendante de la surface totale de la cellule solaire. Cela signifie que la valeur de V_{co} reste constante pour une même condition d'illumination et de température, quel que soit la taille de la surface de la cellule solaire. Cette observation est confirmée par l'utilisation de l'équation suivante [19] :

$$V_{co} = V_T \times \ln\left(1 + \frac{I_{cc}}{I_0}\right) \quad (II.7)$$

II.4.3 Le facteur de forme (FF)

Un paramètre essentiel utilisé pour évaluer la qualité d'une cellule solaire est le facteur de forme (FF). Ce coefficient est calculé à partir de la courbe caractéristique $I(V)$ de la cellule. Il représente le rapport entre la puissance maximale (P_{max}) et la puissance formée par le rectangle délimité par les valeurs de tension de circuit ouvert (V_{co}) et de courant de court-circuit (I_{cc}). Une valeur élevée de ce facteur indique une plus grande disponibilité de puissance exploitable. Ainsi, les meilleures cellules solaires sont conçues en prenant en compte des compromis technologiques visant à se rapprocher autant que possible des caractéristiques idéales.

La relation suivante définit le facteur de forme [20,21] :

$$FF = \frac{P_{max}}{I_{cc} \times V_{co}} = \frac{V_m \times I_m}{V_{co} \times I_{cc}} \quad (II.8)$$

Avec :

I_m : courant à la puissance maximale de fonctionnement de la cellule photovoltaïque.

V_m : tension à la puissance maximale de fonctionnement de la cellule photovoltaïque.

Le facteur de forme possède une dimension géométrique, représentée par le rapport entre la surface du rectangle hachuré et la région plus large, comme illustré dans la figure II.9 :

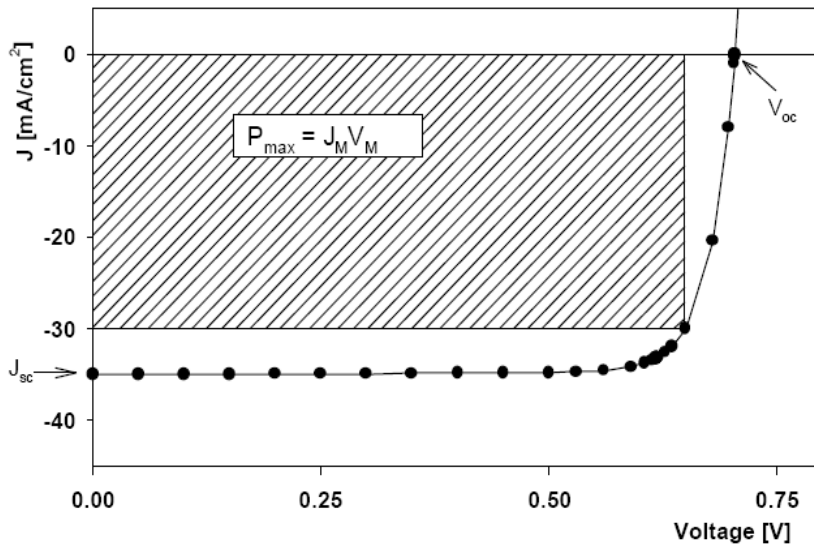


Figure II.9 : Caractéristique J-V avec les paramètres importants [22].

II.4.4 Le rendement (η)

L'efficacité de conversion est le paramètre principal utilisé pour comparer les performances des différentes cellules solaires. Elle est définie par le rendement de conversion (η), qui représente le rapport entre la puissance maximale (P_m) produite par la cellule et la puissance du rayonnement solaire incident (P_{in}) sur cette cellule photovoltaïque [23]. L'efficacité dépend donc de l'intensité de la lumière incidente ainsi que de la température de la cellule solaire. Il est important de contrôler les conditions dans lesquelles l'efficacité de la cellule est mesurée afin de permettre une comparaison équitable entre différentes cellules. En général, les rendements des cellules solaires sont mesurés à une température de 25°C et avec une lumière AM1.5. L'efficacité de conversion est calculée selon l'équation suivante [24]:

$$\eta = \frac{P_m}{P_{in}} = \frac{FF \times I_{cc} \times V_{co}}{P_{in}} \quad (II.9)$$

Une observation importante est que le rendement d'une cellule solaire est directement proportionnel à trois paramètres photovoltaïques clés : la tension de circuit ouvert, la densité de courant de court-circuit et le facteur de forme, pour une certaine valeur d'irradiance G . Le rendement est généralement exprimé en pourcentage (%) [25].

II.4.5 La réponse spectrale d'une cellule photovoltaïque RS

La réponse spectrale d'une cellule photovoltaïque désigne l'efficacité avec laquelle elle convertit l'énergie d'un rayonnement spécifique à une certaine longueur d'onde en énergie électrique.

La réponse spectrale (RS) est une méthode permettant d'évaluer le rendement quantique d'une cellule solaire en fonction de la longueur d'onde de la lumière incidente. Cette efficacité dépend principalement des propriétés du matériau constituant la cellule photovoltaïque, car lorsqu'une cellule solaire est exposée au rayonnement solaire, seule une partie de ce rayonnement sera convertie en électricité. La mesure de la réponse spectrale implique l'illumination de la cellule solaire avec une source monochromatique dont la longueur d'onde est variée dans la plage d'absorption du matériau. La sélection de ces longueurs d'onde est justifiée par le fait que les photons doivent avoir une énergie suffisante pour exciter les électrons du matériau [26]. En mesurant le courant généré par la cellule en fonction de la longueur d'onde, il est possible de déterminer la réponse spectrale de la cellule en utilisant la relation suivante [27,10] :

$$RS(\lambda) = \frac{I_{cc}(\lambda)}{P_{in}(\lambda)} \quad (II.10)$$

C'est en général cette grandeur qui est mesurée et qui permet de calculer le rendement quantique, en prenant en compte l'énergie des photons [28] :

$$RS = \frac{q \times \lambda}{h \times c} \times QE \quad (II.11)$$

Où :

q : la charge d'électron.

h : la constante de planck ($kg \cdot m^2 \cdot s^{-1}$).

c : la célérité de la lumière dans le vide ($m \cdot s^{-1}$).

λ : la longueur d'onde (nm).

QE : l'efficacité quantique.

II.5 L'efficacité quantique QE

L'efficacité quantique (QE) peut être définie comme le rapport entre le nombre de porteurs collectés à la sortie de la cellule et le nombre de porteurs générés par les photons incidents à une longueur d'onde spécifique. Chaque photon incident engendre la formation d'une paire électron-trou qui contribue au courant photoélectrique. Par conséquent, l'efficacité quantique peut théoriquement atteindre 100 % en l'absence de réflexion à la surface frontale de la cellule solaire et de phénomènes de recombinaison. Cependant, avec les techniques de fabrication modernes utilisées actuellement, la réflexion à la surface frontale de la cellule solaire reste généralement autour de 30 %.

Il est essentiel de prendre en compte la courbe d'efficacité quantique lors de la pénétration des photons dans une cellule solaire. Cette courbe nous permet d'identifier les pertes significatives qui peuvent se produire au sein de la structure de ce dispositif optoélectronique [29].

$$QE(\lambda) = \frac{n(\lambda)}{N(\lambda)} \quad (\text{II.12})$$

La variable $n(\lambda)$ représente le nombre de paires électron-trou générées qui contribuent au courant, tandis que $N(\lambda)$ représente le nombre de photons incidents, tous deux mesurés à une longueur d'onde spécifique [22].

En conséquence, il est possible de définir les efficacités quantiques externes et internes, notées respectivement $EQE(\lambda)$ et $IQE(\lambda)$. Le rendement quantique externe correspond au rapport entre le nombre d'électrons dans le circuit externe et le nombre de photons incidents. Le rendement quantique externe est défini de la manière suivante [22] :

$$EQE(\lambda) = \frac{h \times c}{q \times \lambda} \quad (\text{II.13})$$

Où :

q : la charge d'électron, h la constante de planck ($\text{kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$).

c : la célérité de la lumière dans le vide ($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$).

λ : la longueur d'onde (nm).

Lorsqu'on ne tient pas compte des photons perdus par réflexion à la fenêtre de la cellule et par transmission à travers toute l'épaisseur de la cellule en raison d'une absorption incomplète, on parle de rendement quantique interne (IQE). Ce paramètre indique le pourcentage d'électrons qui contribuent au photocourant par rapport au nombre réel de photons qui ont été effectivement absorbés dans la cellule.

$$IQE(\lambda) = \frac{EQE(\lambda)}{1-R(\lambda) \times A(\lambda) \times T(\lambda)} \quad (II.14)$$

Avec :

$R(\lambda)$: la réflectivité de la cellule.

$T(\lambda)$: le rayonnement transmis à travers la cellule.

$A(\lambda)$: l'absorption dans les couches non actives (%).

II.6 Les cellules photovoltaïques à base d' $In_xGa_{1-x}N$

Les cellules photovoltaïques qui affichent les rendements les plus élevés, que ce soit pour les structures simples ou multijonctions, sont fabriquées à partir de matériaux III-V. Parmi ces matériaux prometteurs pour les cellules solaires, on trouve l'alliage InGaN, un semi-conducteur à composition variable qui présente de nombreux avantages [30]. L'alliage InGaN possède également un fort potentiel pour les applications photovoltaïques. Son avantage principal réside dans sa capacité à ajuster son bande interdite sur presque tout le spectre solaire, ainsi qu'un coefficient d'absorption élevé. Au cours des dernières années, de nombreuses études ont été menées sur différentes structures de cellules solaires basées sur l'InGaN. Les recherches théoriques ont produit des résultats très prometteurs, que ce soit pour les cellules solaires multijonctions, les hétérojonctions ou les homojonctions. En 2003, J. Wu a suggéré dans son étude intitulée "Superior Radiation Resistance of InGaN Alloys: Full-Solar-Spectrum Photovoltaic Material" l'utilisation de l'alliage InGaN pour la conception de cellules solaires mettant en évidence les caractéristiques uniques de l'InGaN, notamment son gap énergétique modulable et sa résistance aux radiations. Depuis lors, de nombreuses recherches se sont concentrées sur ce type de matériau.

Nous allons donc voir dans cette partie, l'état de l'art des cellules solaires à base d'InGaN, d'abord en présentant les structures de type PN et PIN ; homojonctions, hétérojonctions et les cellules solaires à multijonctions.

II.6.1 Les cellules solaires à jonction (PN, PIN)

Les cellules solaires classiques se basent sur une jonction PN, qui se réfère à la combinaison de deux matériaux semi-conducteurs présentant un dopage de type p et de type n distincts. Lorsque la jonction est constituée du même matériau, nous l'appelons une homojonction. En revanche, si deux matériaux différents sont utilisés, nous la qualifions d'hétérojonction. Une jonction PIN comprend trois régions dopées de manière différente. Comme son nom l'indique, une couche intrinsèque ou non dopée est intercalée entre une région dopée p et une région dopée n. La structure PIN est largement utilisée, et la cellule solaire à structure PIN constitue l'un des principaux aspects de cette étude.

II.6.1.1 Les homojonctions

Diverses études ont été réalisées sur les cellules photovoltaïques à homojonction utilisant l'InGaN comme matériau de base. L'objectif principal de ces recherches était d'améliorer les rendements expérimentaux de ces cellules.

En 2009, Zeng et al. [32] ont mené une étude sur une structure homojonction PIN à base d'InGaN fabriquée par MOVPE. Leur objectif était d'évaluer l'impact du contact ohmique au niveau de la couche P en utilisant deux types de contacts : un contact ohmique semi-transparent et un contact ohmique en grille. Les cellules solaires à contact p semi-transparent présentaient un facteur de forme (FF) de 69,4 %, une tension en circuit ouvert (V_{co}) de 2,24 V et une efficacité quantique externe (EQE) de 41,0 %. D'autre part, les appareils avec contact p de grille ont montré les valeurs correspondantes de 57,6 %, 2,36 V, 47,9 % et une densité de puissance plus élevée.

Ces résultats indiquent qu'il est possible d'obtenir des photo-réponses significatives dans les cellules solaires InGaN p-i-n. La figure II.10 présente la configuration de cette cellule solaire.

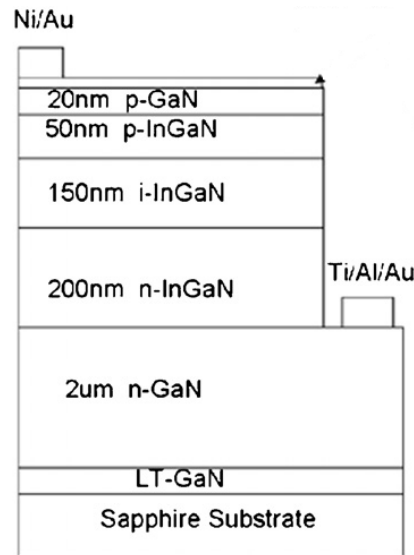


Figure II.10 : Schéma de la cellule solaire PIN à double hétérojonction proposée par Zeng et al [32].

En 2010, l'équipe de Kuwahara et ses collègues [33] ont fabriqué une cellule solaire PIN à base d'InGaN contenant 10% d'indium sur deux substrats différents : le saphir (Al_2O_3) et le GaN. La figure II.11 présente une vue schématique de deux structures :

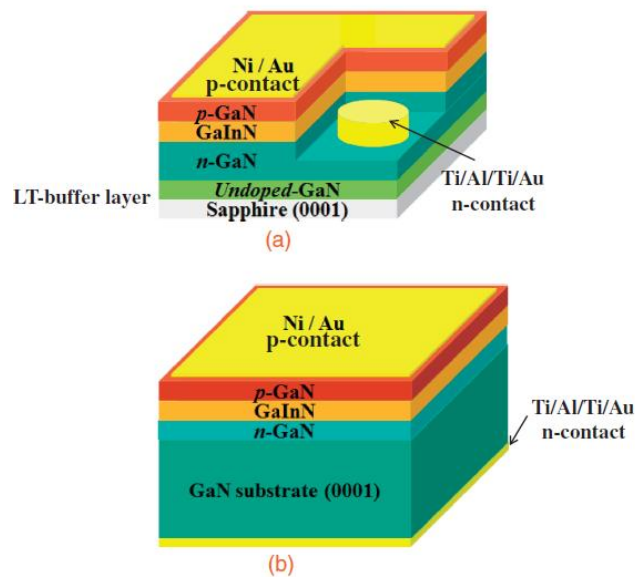


Figure II.11 : (a) cellule solaire à base de GaInN avec une couche épaisse de $u\text{-Ga}_{0,89}\text{In}_{0,11}\text{N}$ (250 nm) sur un substrat en saphir recouvert d'une couche tampon déposée à basse température (LT) et (b) à base de GaInN cellule solaire avec une couche épaisse de $u\text{-Ga}_{0,90}\text{In}_{0,10}\text{N}$ (250 nm) sur un substrat de GaN autoportant [33].

Leurs travaux ont démontré que la croissance sur un substrat de GaN permet de réduire la densité de défauts dans les couches épitaxiales, l'efficacité de la cellule solaire à base de nitrure cultivée sur le substrat GaN a atteint 1,41 % et 0,98 % pour l'autre cultivée sur le saphir.

En 2013, Islam et ses collègues [34] ont démontré des résultats exceptionnels en utilisant une structure homojonction similaire avec une teneur élevée en indium (25 %). La cellule solaire était constituée d'une jonction N⁺P d'In_{0,25}Ga_{0,75}N d'une épaisseur totale de 700 nm, qui était déposée sur une couche de GaN mesurant 1,4 μm en épaisseur ; donnant de meilleures performances avec une tension en circuit ouvert de 1,5 V et une densité de courant de court-circuit de 0,5 mA/cm². La structure est représentée dans la figure II.12 :

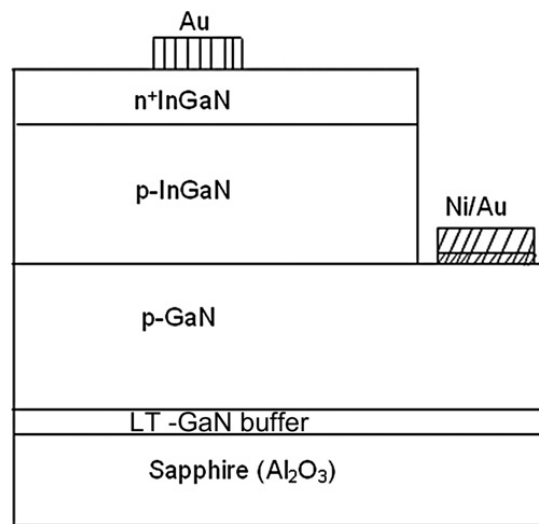


Figure II.12 : Schéma de la cellule solaire PIN homojonction proposée par Islam et al. [34]

En 2014, Shloe et ses collègues [35] ont mené une étude sur une structure PIN sous éclairage AM1.5 présentée dans la figure II.13. L'objectif de leur étude était d'analyser l'impact de la concentration d'indium dans la couche intrinsèque. Les résultats ont révélé qu'un rendement optimal de 17% était atteint avec une couche intrinsèque d'une épaisseur de 500 nm et une composition d'indium de 0,55. Ces résultats suggèrent que les cellules solaires à base d'InGaN atteignent leur rendement optimal avec des concentrations d'indium élevées, dépassant les 50%. De plus, des simulations numériques ont également été réalisées sur des cellules homojonctions InGaN en complément de l'étude.

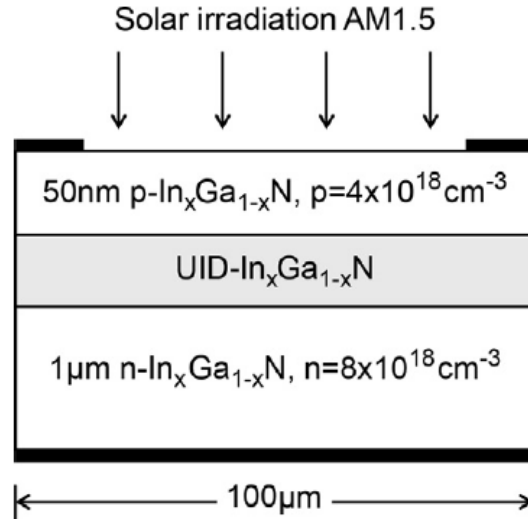


Figure II.13 : Structure schématique d'une cellule solaire homo-jonction

$n\text{-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{UID-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/p\text{-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ [35].

Les cellules utilisant une structure homojonction présentent des problèmes tels qu'une densité de courant très faible et une dégradation fréquente du facteur de forme, principalement en raison de défauts structurels causés par le désaccord de maille entre le substrat et la couche d'épitaxie d'InGaN. Ces défauts agissent comme des centres de recombinaison pour les porteurs de charge générés par la lumière, ce qui entraîne une détérioration de l'efficacité de collecte de ces porteurs. De plus, les cellules solaires à jonction unique subissent une perte significative du spectre solaire incident, qui se transforme en chaleur.

Pour résoudre ce problème, une solution proposée consiste à utiliser une série de cellules avec des bandes interdites graduées. Ainsi, la structure comprend un semi-conducteur qui peut convertir de manière optimale l'énergie de chaque photon.

II.6.1.2 Les hétérojonctions

Ces dernières années, de nombreuses recherches ont été menées sur les cellules solaires PIN à hétérojonction basées sur InGaN, et des progrès significatifs ainsi que des résultats prometteurs ont été obtenus avec ce type de semi-conducteurs. Parmi ces études, l'une des premières réalisations remonte à 2007, lorsque Jani et al. [36] ont développé une cellule photovoltaïque présentant les caractéristiques suivantes : une tension en circuit ouvert (V_{co}) de 2,4 V, une densité de courant de court-circuit (J_{sc}) de 3,7 mA/cm², un facteur de forme (FF) de 78 % et un rendement de 6,93%. Le schéma de la structure est représenté dans la Figure II.14 :

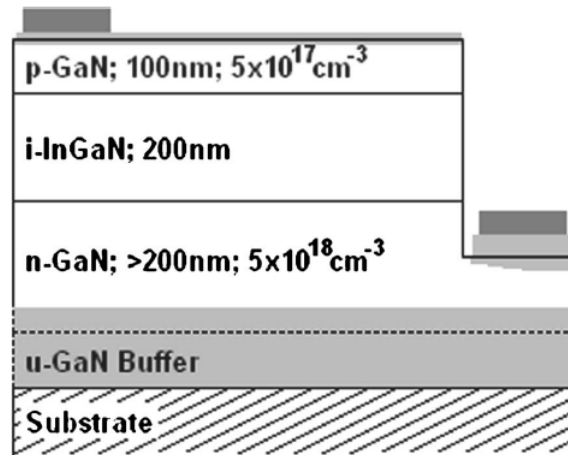


Figure II.14 : Schéma de la cellule solaire pin en double hétérojonction proposée par Jani et al. [36].

En 2008, Neufled et ses collègues [37] ont entrepris une étude supplémentaire portant sur une structure de cellule solaire PIN à hétérojonction présenté dans la figure II.15. La fabrication de cette structure a également été réalisée par MOVPE (épitaxie en phase vapeur aux organométalliques). L'une des caractéristiques clés de cette cellule solaire était sa composition d'indium, notée x , qui était égale à 0,12. Cette étude visait à explorer les propriétés et les performances de la cellule solaire PIN à hétérojonction avec cette composition spécifique d'indium. Les cellules solaires ont un facteur de forme de 75%, une densité de courant de court-circuit de $J_{cc} = 4,2 \text{ mA/cm}^2$ et une tension en circuit ouvert de $V_{co} = 1,81 \text{ V}$ sous éclairage AM0. Il a été observé que l'efficacité quantique externe peut être améliorée en optimisant la grille de contact supérieure.

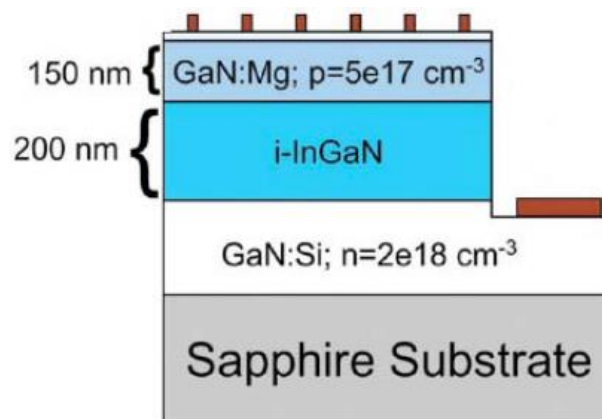


Figure II.15 : Schéma de la cellule solaire pin hétérojonction proposée par Neufled et ses collègues [37].

En 2010, Dahal et ses collègues [38] ont mené des études visant à améliorer la qualité cristalline du matériau InGaN. Leur approche consistait à proposer une nouvelle structure de cellule hétérojonction InGaN/GaN utilisant des puits quantiques multiples, qui étaient déposés entre deux couches de GaN de type N et P (Voir figure II.16), agissant ainsi en tant que couches actives de la cellule solaire. L'objectif était d'améliorer les performances de la cellule en optimisant la qualité du matériau cristallin utilisé dans la structure. L'efficacité globale passe de 2,95 % à 3,03 % et pourrait être améliorée en améliorant encore la qualité du matériau.

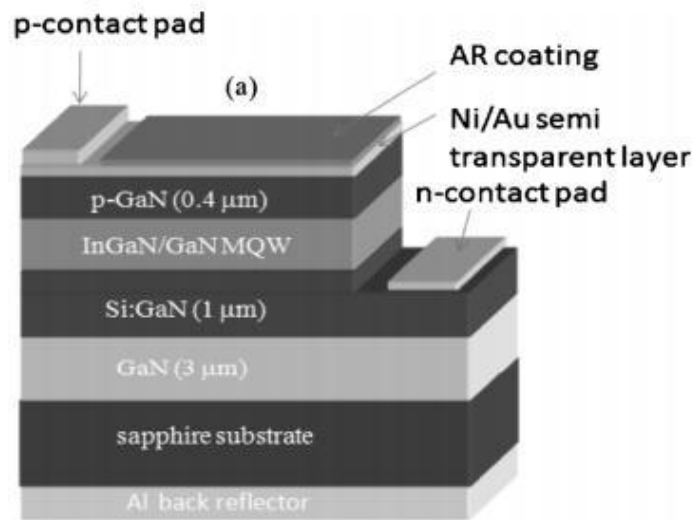


Figure II.16 : Structure de cellule solaire InGaN / GaN avec 12 périodes de 3nm d'épaisseur

$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 0,35 QW et 17 nm d'une barrière GaN [38].

En 2012, Tran et ses collègues [39] ont réalisé une étude sur une cellule photovoltaïque qui comportait une couche active d'une épaisseur de 300 nm composée d' $\text{In}_{0,4}\text{Ga}_{0,6}\text{N}$ (figure II.17). Les dispositifs de cellules solaires avec ITO comme contacts de type n ont également été comparés à la cellule solaire utilisant Ti/Al/Ni/Au comme contact de type n dans cette étude. Le dispositif avec contact ITO présentait une tension en circuit ouvert (V_{co}) de 1,52 V et une densité de courant de court-circuit (J_{cc}) de 8,68 mA/cm² avec un facteur de forme de 54 %. La conversion et l'efficacité quantique externe (EQE) de la cellule solaire étaient respectivement de 7,12 et 20,8 %.

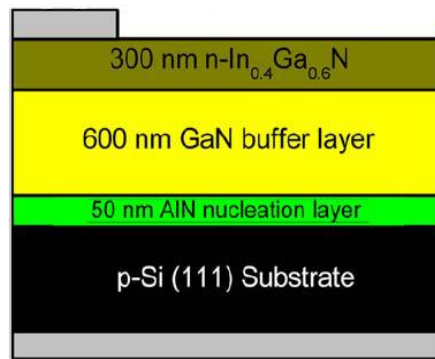


Figure II.17 : Schéma de la cellule solaire pin à hétérojonction n-In_{0,4}Ga_{0,6}N/p-Si proposée par Tran al. [39].

En 2014, Çakmak et ses collègues [40] ont entrepris une étude approfondie sur une structure de cellule solaire PIN. Dans cette étude, ils ont utilisé une couche InGaN qui présentait une composition d'indium graduée comme illustré sur la figure II.18. Cette couche a été fabriquée par MOVPE (épitaxie en phase vapeur aux organométalliques), une technique couramment utilisée pour la croissance de couches de matériaux semi-conducteur. L'objectif de l'étude était d'explorer les propriétés et les performances de cette structure spécifique de cellule solaire PIN, en se concentrant sur l'effet de la composition d'Indium graduée dans la couche InGaN ; la composition de 15,7 à 7,1 % d'Indium présente de meilleures performances avec une densité de courant de court-circuit de 6 mA/cm², une tension en circuit ouvert de 0,25 V, un facteur de forme de 39,13 %, et le meilleur rendement mesuré sous un simulateur solaire standard avec des sources lumineuses globales d'une masse d'air d'un soleil de 1,5 (100 mW/cm²) à température ambiante pour les dispositifs finis était de 0,66 %.

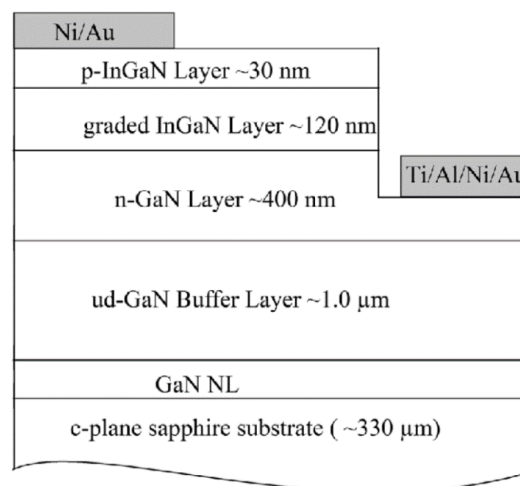


Figure II.18 : Schéma de la structure de cellule solaire PIN étudiée par Çakmak et al. [40]

Récemment, une attention particulière a été accordée aux puits quantiques InGaN/GaN dans les études sur les structures à hétérojonction. L'objectif de ces études était d'améliorer la qualité cristalline de la couche active à base d'InGaN dans la cellule solaire.

En 2016, Zheng et ses collègues [41] ont développé une structure représentée dans la figure II.19 à puits quantiques (GaN-MQWs-GaN). La cellule solaire, soumise à un éclairage AM1.5, a produit une tension en circuit ouvert (V_{oc}) de 1,9 V, une densité de courant de court-circuit (J_{sc}) de 1,6 mA/cm² et un facteur de forme (FF) de 0,746 ce qui a donné un rendement de conversion (η) de 2,3 %.

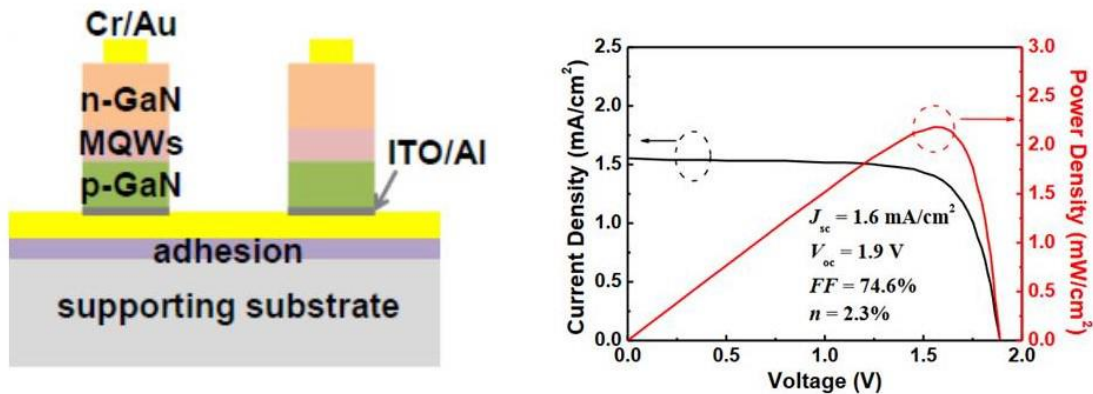


Figure II-19 : Schéma de la structure de cellule solaire à puits quantiques étudiée par Zheng et al. et les caractéristiques électriques de la cellule solaire [41].

En 2017, Liu et ses collègues [42] ont examiné deux structures de cellules solaires basées sur des puits quantiques InGaN/GaN comme illustré dans la figure II.20. L'une de ces structures avait une composition d'indium de 0,14, ce qui a conduit à une tension en circuit ouvert de 2,13 V, une densité de courant de court-circuit de 2,55 mA/cm², un facteur de forme de 65,7 % et un rendement de conversion de 3,56 % et l'efficacité quantique externe maximale peut atteindre plus de 60 %. En revanche, l'autre structure avait une composition d'indium de 0,19, avec un rendement de conversion plus faible de 1,04 %. Cette différence de performance était attribuée à des variations de qualité cristalline entre les deux structures.

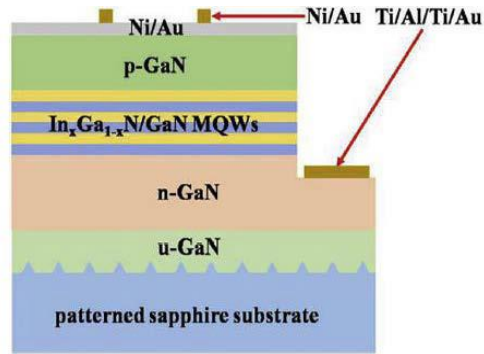


Figure II-20 : Schéma de la structure de cellule solaire à puits quantiques InGaN/GaN étudiée par Liu et al. [42].

En 2020, Chouchen et ses collègues [43] ont étudié des films minces à hétérojonction $\text{Cu}_2\text{O}/\text{InGaN}$ avec différentes épaisseurs de couche de Cu_2O comme photoanode dans une cellule de division d'eau photo-électrochimique (PEC). Les résultats montrent que l'énergie de bande interdite des couches minces à hétérojonction $\text{Cu}_2\text{O}/\text{InGaN}$ est de 2,60 à 2,72 eV et, selon la loi de Vegard, la teneur en indium de la couche mince d'InGaN est de 22 %. Une densité de photocourant maximale de $0,16 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}$ à 0,5 V, La densité de photocourant obtenue pour l'hétérojonction $\text{Cu}_2\text{O}/\text{InGaN}$ avec une épaisseur totale d'environ 250 nm est 4,2 et 8 à 3,2 fois supérieure à celle des photoanodes à couches minces pures d'InGaN et de Cu_2O , respectivement (voir figure II.21)

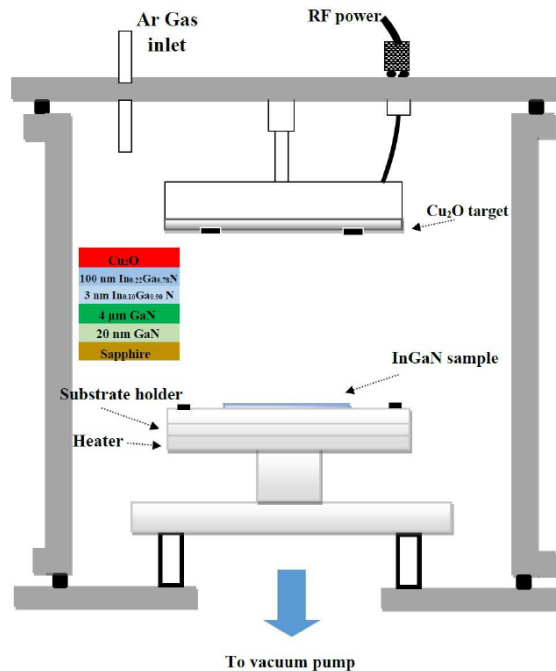


Figure II.21 : Croquis schématique du réacteur de pulvérisation magnétron réactif RF et de la structure des films minces à hétérojonction fabriqués [43].

II.5.2 Les cellules solaires à multijonction

Les cellules solaires multijonctions sont une technologie qui vise à maximiser l'absorption du spectre solaire en utilisant des jonctions PN avec des bandes d'énergie interdites différentes. Ces jonctions sont superposées pour former une cellule solaire multijonction. Chaque sous-cellule est optimisée pour absorber une partie spécifique du spectre solaire en fonction de sa bande interdite. Les cellules solaires multijonctions sont généralement fabriquées à partir de matériaux III-V, la méthode de fabrication la plus courante pour ces cellules est la MOVPE [44].

Différentes études ont été menées sur les structures de cellules solaires multijonctions à base d'InGaN. En 2008, Zhang et al. [45] ont réalisé une simulation d'une cellule solaire multijonction utilisant de l'InGaN. Cette structure était composée de deux jonctions : la première avec une composition d'indium de 0,48 et la seconde avec une composition d'indium de 0,73. L'efficacité optimale est de 35,1 % pour le spectre global AM1.5, avec une combinaison de bande interdite de cellules supérieure/inférieure de 1,74 eV/1,15 eV. Et l'efficacité limite est de 40,9 % pour la concentration lumineuse la plus élevée du spectre global AM1.5, avec la bande interdite des cellules supérieure/inférieure de 1,72 eV/1,12 eV. Cependant, dans cette étude, la jonction tunnel qui devait assurer la connexion électrique entre les deux sous-cellules n'a pas été prise en compte, ce qui explique en grande partie le rendement très élevé. De plus, dans leur approche de modélisation, le rendement quantique interne était égal au rendement quantique externe, ce qui signifie qu'aucune perte de photons n'était prise en compte. Les phénomènes de recombinaison, de polarisation et les défauts structuraux n'ont pas été pris en compte non plus, et le coefficient d'absorption a été considéré comme constant en termes de composition d'indium et de longueur d'onde dans toute la structure. La figure II.22 montre la structure de la cellule solaire simulée par Zhang et al. [45].

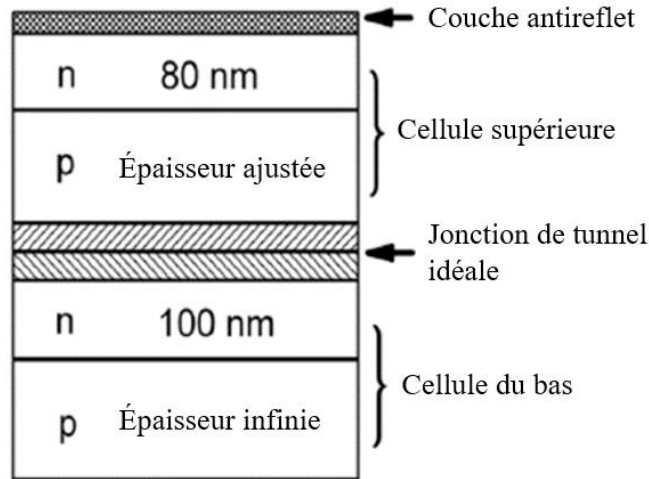


Figure II.22 : Schéma de la cellule solaire à double-jonction simulée par Zhang et al. [45].

En 2014, Young et ses collègues [46] ont fabriqué, par MOVPE, une structure multijonctions comprenant une couche de puits quantiques InGaN/GaN, comme représentée dans la Figure II-23. Ils ont incorporé un revêtement optique à large bande pour améliorer l'absorption de la lumière dans la cellule. L'application de revêtements optiques a augmenté le pic de l'efficacité quantique externe de 56 % (relative), l'efficacité de conversion de 37,5 % (relative), une densité de courant de court-circuit de 2,97, mA/cm², une tension en circuit ouvert de 2,26 V et le facteur de forme environ 67,9 % sous un ensoleillement équivalent AM0.

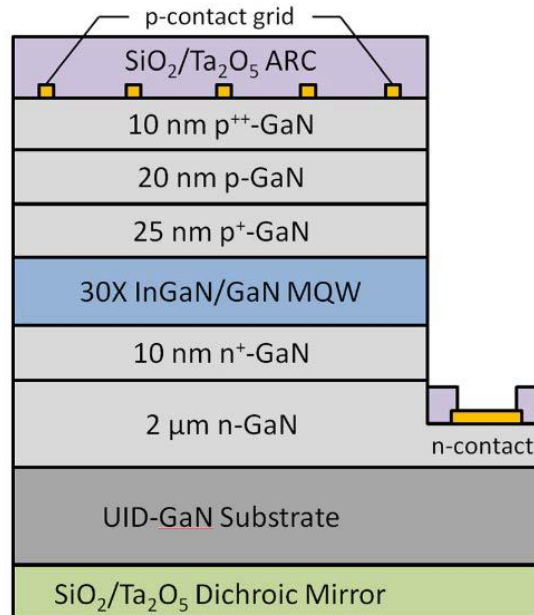


Figure II.23 : Schéma de la cellule solaire multijonction proposée par Young et al. [46]

En 2022, Shan et ses collègues [47], ont étudié théoriquement et expérimentalement le mécanisme de dégradation des cellules solaires InGaN/GaN à puits multi-quantiques (MQW), le schéma est représenté dans la figure II.24. Des cellules solaires InGaN/GaN MQW avec des puces de taille $1 \times 1 \text{ mm}^2$ ont été fabriquées et caractérisées dans une plage de températures allant de $50 \text{ }^\circ\text{C}$ à $250 \text{ }^\circ\text{C}$ afin de déterminer les effets des dislocations sur leur efficacité. L'intensité interne des diffractions des rayons X a été utilisée pour construire un modèle physique 2D de la densité des dislocations de bord dans le MQW InGaN/GaN qui a ensuite été simulé à Silvaco. Les résultats montrent que l'erreur relative en η entre la simulation et l'expérience était inférieure à 5 % sur la plage de température examinée.

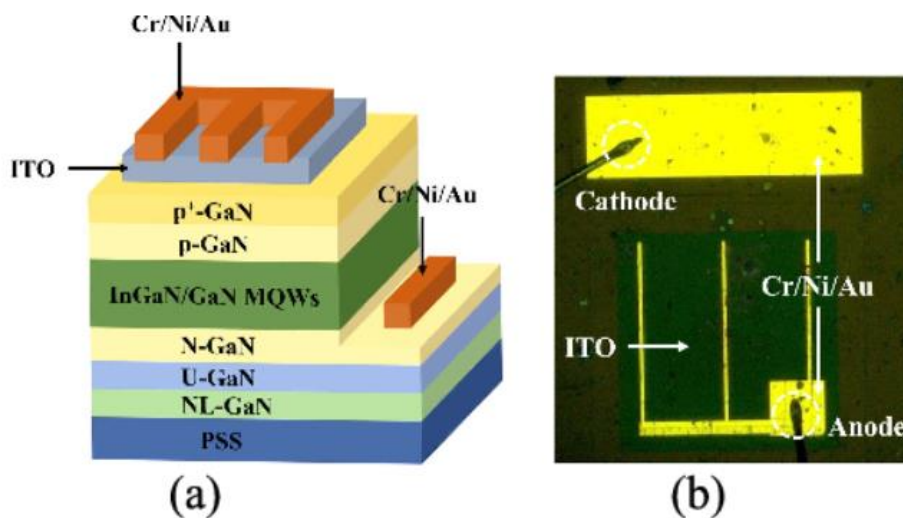


Figure II.24 : (a) Schéma de la cellule solaire InGaN/GaN MQW.

(b) Vue de dessus du dispositif fabriqué [47].

II.6 Les Avantages et les défis de l'InGaN pour les cellules photovoltaïques

En général, les nitrures des éléments III présentent une meilleure résistance, une moindre sensibilité aux températures élevées et une plus grande durabilité par rapport aux matériaux à base de phosphures-III et d'arséniures- III.

Le matériau semi-conducteur $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ offre de nombreux avantages pour la conception de cellules solaires. Récemment, un fort intérêt s'est porté sur l'alliage ternaire InGaN dans le domaine de l'optoélectronique en raison de ses propriétés optiques, telle qu'une large bande interdite directe et ajustable, pouvant théoriquement varier entre 0,67 et 3,4 eV [48]. De plus, il présente des propriétés électriques intéressantes, notamment de faibles masses effectives et

une mobilité relativement élevée des porteurs [49]. Le coefficient d'absorption élevé de l'InGaN suggère qu'il a le potentiel de créer la prochaine génération de cellules solaires [50].

En outre, la largeur de bande interdite d'InGaN lui confère une résistance élevée à la chaleur, contrairement aux dispositifs à base de silicium qui perdent en efficacité lorsqu'ils sont exposés à la lumière solaire. Les alliages InGaN ont la capacité de résister à de fortes doses de rayonnement tout en conservant leurs propriétés par rapport à d'autres matériaux [51]. De plus, le matériau InGaN ne contient aucun élément toxique, comme le cadmium ou l'arsenic, ce qui a un impact positif sur les préoccupations environnementales.

Cependant, il représente un défi d'incorporer de grandes quantités d'indium dans le matériau tout en préservant une qualité cristalline élevée. Cela est dû à l'incompatibilité entre les réseaux cristallins du GaN et de l'InN [52].

Selon les études menées sur les nitrures des éléments III, l'alliage InGaN présente d'excellentes propriétés optiques ; on peut voir dans le tableau récapitulatif II-1, les paramètres optiques des composants GaN et InN, ce qui en fait que l'InGaN est un absorbant de lumière très efficace. Il s'avère être un choix supérieur au silicium et à d'autres matériaux semi-conducteurs pour la création de cellules solaires à couche mince. En effet, une couche mince d'à peine 100 nm de cet alliage est suffisante pour absorber la totalité du spectre lumineux, incluant une longueur d'onde de 500 nm. En comparaison, le silicium cristallin aurait besoin d'une épaisseur d'environ 1000 nm pour absorber environ 90 % de ce même spectre [49].

Matériau	GaN	InN
Indice réfraction	2,3	2,9
Constantes diélectriques statiques	10,4	14,4
	9,5	13,4
Constantes diélectriques à haute fréquence	5,8	8,4
	5,35	
Coefficient d'absorption (cm ⁻¹)	10 ⁵	5.10 ⁴

Tableau II-1 : des paramètres optiques des composants GaN et InN [53,54].

Par conséquent, Les alliages InGaN sont hautement considérés pour leur potentiel dans la conversion en cellules solaires à rendement exceptionnellement élevé. Leurs propriétés uniques

leur confèrent une efficacité accrue dans la transformation de l'énergie solaire en électricité. Ces matériaux sont donc très prometteurs pour l'avenir de l'énergie solaire.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons exploré en détail les principaux aspects des cellules solaires, en abordant leurs concepts fondamentaux et leur fonctionnement. Nous avons discuté de l'effet photovoltaïque, qui est à la base de la conversion de l'énergie solaire en électricité, ainsi que du schéma électrique équivalent d'une cellule solaire et du module photovoltaïque. Nous avons également examiné les caractéristiques électriques essentielles d'une cellule photovoltaïque, telles que les courbes $I(V)$ qui décrivent la relation entre le courant et la tension. En analysant ces courbes, nous avons pu déduire différents paramètres électriques importants, tels que le rendement, le facteur de forme et le courant de court-circuit, qui sont des indicateurs clés des performances d'une cellule solaire. Ensuite, nous avons exploré l'état de l'art des cellules solaires à base d'InGaN, mettant en évidence les avantages significatifs de ce matériau pour la réalisation de cellules solaires à haut rendement, qu'elles soient à jonction simple ou à jonctions multiples. Enfin, nous avons discuté des avantages offerts par l'InGaN ainsi que des défis associés à son utilisation dans les cellules photovoltaïques. Ce chapitre a permis de mieux comprendre les principes et les caractéristiques des cellules solaires, en mettant en évidence le potentiel prometteur d'InGaN dans le domaine de l'énergie solaire, tout en soulignant les défis qui doivent être relevés pour exploiter pleinement ses avantages.

Dans la partie suivante, nous aborderons la simulation et l'optimisation des paramètres optoélectroniques des structures de cellules solaires étudiées dans le cadre de notre recherche. Nous explorerons en détail les méthodes utilisées pour modéliser ces structures et évaluer leurs performances. Nous nous concentrerons sur la manipulation des paramètres clés tels que la composition, l'épaisseur des couches, les caractéristiques des matériaux, etc., afin d'optimiser les performances des cellules solaires. Le troisième chapitre nous permettra de comprendre comment les simulations numériques ont été utilisées pour étudier et améliorer les paramètres optoélectroniques des cellules solaires étudiées, et comment cette approche a contribué à l'avancement de notre recherche.

Références de chapitre II:

- [1] S. Beghdadi, "Etude des performances d'une cellule solaire de type Cu (In, Ga) Se₂(CIGS)" mémoire de master, université Aboubakr Belkaid Tlemcen, (2016).
- [2] Shockley, William, and Hans Queisser. "Detailed balance limit of efficiency of p–n junction solar cells." *Renewable Energy*. Routledge, 2018. Vol2_35-Vol2_54.
- [3] Gowri Sivaraman, "Characterization of Cadmium Zinc Telluride Solar Cells" 2003, Thèse de doctorat université de Floride du Sud.
- [4] Mathieu, Henry, and Hervé Fanet. "Physique des semiconducteurs et des composants électroniques-6ème édition: Cours et exercices corrigés". Dunod, 2009.
- [5] Gorge, Vanessa. "Caractérisations de matériaux et tests de composants des cellules solaires à base des nitrures des éléments III-V". 2012. Thèse de doctorat. Paris 11.
- [6] Mohamed Mimoune, "Etudes des capteurs photovoltaïques basées sur les nanotechnologies" .Thèse de doctorat, université du Québec 2016.
- [7] Oleksiy, Nichiporuk. "Simulation, fabrication et analyse de cellules photovoltaïques à contacts arrières interdigités." Institut national des sciences appliquées de Lyon (2005).
- [8] D. Diouf, "Cellules photovoltaïques silicium à hétérojonctions et à structures interdigitée en face arrière," thèse de doctorat, Paris 11, 2010.
- [9] S. Quoizola, "Epitaxie en phase vapeur de silicium sur silicium méso poreux pour report sur substrats économiques et application photovoltaïque bas coût", Thèse de doctorat, l'institut national des sciences appliquées de Lyon, 2003.
- [10] K. Djeriouat, "Optimisation du rendement des cellules photovoltaïques à hétérojonctions GaInP/GaAs," mémoire de magister, Université Abou-bakr Belkaid-Tlemcen, 2011.
- [11] Patrick Houée, Ressources pour les STIED, "Une installation photovoltaïque en site isolé", forum des technologies, Septembre- Octobre 2011 page 32.
- [12] Kim Salah, "Effet de la fraction molaire sur la cellule solaire en InGaN", mémoire de master Université Mohamed Khider de Biskra-2018.
- [13] Yacine MAROUF, "Modélisation des cellules solaires en InGaN en utilisant Atlas Silvaco", mémoire de magister, université de Mohamed Khider – Biskra-2013.
- [14] Wilfried Favre. "Silicium de type n pour cellules a hétérojonctions : caractérisations et modélisations». Thèse de doctorat, université Paris Sud - Paris XI, 2011. Français.
- [15] Mathieu, Henry, Thierry Bretagnon, and Pierre Lefebvre. "Physique des Semiconducteurs et des Composants Electroniques-Problèmes Résolus", livre, Dunod, 2001.
- [16] Green, Martin A. "Photovoltaic principles." *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Elsevier.14.1-2 (2002): 11-17.
- [17] Aoun, Nouar, and R. Chenni. "Etude et modélisation des différents modèles de la cellule photovoltaïque établis sur base de valeurs nominales", mémoire de magister (2010).
- [18] Goetzberger, Adolf, Christopher Hebling, and Hans-Werner Schock. "Photovoltaic materials, history, status and outlook" .*Materials science and engineering: R: Reports* 40.1 (2003): 1-46.
- [19] Luis Castaner and Santiago Silvestre, "Modelling Photovoltaic Systems using PSpice", livre.Université de Catalogne, Barcelone, Espagne 2003.
- [20] I.M. Dharmadasa, "Advances in Thin-Film Solar Cells", second edition, Jenny Stanford Publishing, Boulevard, 2018. <https://doi.org/10.1201/9780429020841>.
- [21] Sheng S.Li, "Electronics, Semiconductor Physical Electronics second edition", livre.Université de Florida 2006.
- [22] Gloeckler, Markus. "Numerical modeling of CIGS solar cells: definition of the baseline and explanation of superposition failure". 2003. Thèse de doctorat. Université d'État du Colorado.
- [23] Anne Labouret and Michel Viloz. "Energie solaire photovoltaïque - 4ème édition".Dunod, October 2009.
- [24] L. Zighed, " Etude de l'influence de nouveaux films antiréfléchissants sur la conversion photovoltaïque" Thèse Doctorat, Université de Constantine, Algérie 2007.
- [25] Pudov, Alexei O. "Impact of Secondary Barriers on CuIn₁ [subscript X] Ga [subscript X] Se₂ Solar-cell Operation". 2005. Thèse de doctorat. Université d'état du Colorado.

- [26] Sridhar, R., et al. "Modeling of PV array and performance enhancement by MPPT algorithm." *International Journal of Computer Applications* 7.5 (2010): 0975-8887.
- [27] Y. Sayade, "Détermination de la longueur de diffusion des porteurs de charges minoritaires dans le silicium cristallin par interaction lumière matière", Thèse de Doctorat, INSA Lyon, 2009.
- [28] Swanson, Richard M. "Approaching the 29% limit efficiency of silicon solar cells." *Compte rendu de la trente et unième conférence des spécialistes du photovoltaïque de l'IEEE*, 2005. IEEE, 2005.
- [29] Wennerberg, Johan. "Design and stability of Cu (In, Ga) Se₂-based solar cell modules". 2002. Thèse de doctorat. Journal de l'université d'Uppsala.
- [30] A. Bhuiyan, K. Sugita, A. Hashimoto and A. Yamamoto, "InGaN Solar Cells: Present State of the Art and Important Challenges," *IEEE Journal of Photovoltaics*, Vol. 2, No. 3, pp. 276-293, Jul. 2012.
- [31] I. Wu, W. Walukiewicz, K. Yu, W. Shan, J. Ager Iii, E. Haller, et al., "Superior radiation resistance of In_{1-x}Ga_xN alloys: Full-solar-spectrum photovoltaic material system," *Journal of Applied Physics*, vol. 94, pp. 6477-6482, 2003.
- [32] Zeng, S. W., et al. "Substantial photo-response of InGaN p-i-n homojunction solar cells." *Semiconductor Science and Technology* 24.5 (2009): 055009.
- [33] Y. Kuwahara, T. Fujii, Y. Fujiyama, T. Sugiyama, M. Iwaya, T. Takeuchi, S. Kamiyama, I. Akasaki, and H. Amano, "Realization of nitride-based solar cell on freestanding GaN substrate", *Applied Physics Express*, vol. 3, no. 11, p. 111001, 2010.
- [34] M. R. Islam, M. R. Kaysir, M. J. Islam, A. Hashimoto, and A. Yamamoto. "MOVPE Growth of In_xGa_{1-x}N and fabrication of Homo-junction Solar Cells". *J. Mater.Sci. Technol.*, vol. 29, pp. 128–136, 2013.
- [35] A. Chloe, M. Fabien and W. Alan Doolittle. "Guidelines and limitations for the design of high-efficiency InGaN single-junction solar cells". *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 130: 354–363, 2014.
- [36] O. Jani, I. Ferguson, C. Honsberg, and S. Kurtz. "Design and characterization of GaN/ InGaN solar cells". *Applied Physics Letters*, 91(13):132117, 2007.
- [37] C. J. Neufeld, N. G. Toledo, S. C. Cruz, M. Iza, S. P. DenBaars, and K. Mishra. "High quantum efficiency InGaN/GaN solar cells with 2.95 eV band gap". *Applied Physics Letters*, 93(14):143502, 2008.
- [38] R. Dahal, J. Li, K. Aryal, J. Y. Lin, and H. X. Jiang. "InGaN/GaN multiple quantum well concentrator solar cells". *Applied Physics Letters*, 97(7):073115, 2010.
- [39] Tran, Binh-Tinh, et al. "Fabrication and characterization of n-In_{0.4}Ga_{0.6}N/p-Si solar cell". *Solar Energy Materials and Solar Cells* 102 (2012): 208-211.
- [40] H. Çakmak, E. Arslan, M. Rudziński, P. Demirel, H. E. Unalan, W. Strupiński, R. Turan, M. Öztürk, and E. Özbay. "Indium rich InGaN solar cells grown by MOCVD". *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 25(8):3652–3658, 2014.
- [41] Z. W. Zheng, M. H. Lai, L. Y. Ying, and B. P. Zhang. "High-efficiency vertical type InGaN/GaN multiple quantum well solar cells using aluminum reflectors". In *2016 IEEE 16th International Conference on Nanotechnology (IEEE-NANO)*, pages 91–93, Aout 2016.
- [42] S. Liu, Q. Wang, H. Xiao, K. Wang, C. Wang, X. Wang, W. Ge, and Z. Wang. "Optimization of growth and fabrication techniques to enhance the InGaN/GaN multiple quantum well solar cells performance". *Superlattices and Microstructures*, 109 :194–200, 2017.
- [43] Alizadeh, Mahdi, et al. "Cu₂O/InGaN heterojunction thin films with enhanced photoelectrochemical activity for solar water splitting." *Renewable Energy* 156 (2020): 602-609.
- [44] F. ABDO, "Croissance de couches minces de silicium par épitaxie en phase liquide à basse température pour application photovoltaïque", Thèse Doctorat, L'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2007.
- [45] Zhang, Xiaobin, et al. "Theoretical design and performance of In_xGa_{1-x}N two-junction solar cells" *Journal of Physics D: Applied Physics* 41.24 (2008): 245104.
- [46] Young. "High-performance broadband optical coatings on InGaN/GaN solar cells for multijunction device integration". *Applied Physics Letters*, 104(16):163902, Avril 2014.
- [47] Shan, Hengsheng, Yun-Jian Mei, and Ning Wang. "Degradation in Efficiency of InGaN/GaN Multiquantum Well Solar Cells with Rising Temperature." *IEEE Transactions on Electron Devices* 69.11 (2022): 6195-6200.
- [48] A.G. Bhuiyan, K. Sugita, A. Hashimoto, and A. Yamamoto, "InGaN solar cells: Present state of the art and important challenges", *IEEE J. Photovoltaics*. 2 (2012)276–293.

- [49] Routray, S. R., & Lenka, T. R. (2018). "InGaN-based solar cells: a wide solar spectrum harvesting technology " for twenty-first century. Transactions CSI sur ICT, 6, 83-96.
- [50] EL Gmili Youssef, "Etude et caractérisations par cathodo-luminescence de couches minces d'InGaN pour le photovoltaïque" 2013, Thèse de doctorat.
- [51] R. Kour, S. Arya, S. Verma, A. Singh, P. Mahajan, A. Khosla, Review. "Recent Advances and Challenges in Indium Gallium Nitride ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$) Materials for Solid State Lighting", ECS J. Solid State Sci. Technol. 9 (2020) 015011. <https://doi.org/10.1149/2.0292001jss>.
- [52] C. Fabien, B. Gunning, W. Alan Doolittle, A. Fischer, Y. Wei, H. Xie and F. Ponce, "Low-temperature growth of InGaN films over the entire composition range by MBE," Journal of Crystal Growth, vol. 425, pp. 115-118, Feb. 2015.
- [53] R. Singh, D. Doppalapudi, T. Moustakas, and L. Romano, "Phase separation in InGaN thick films and formation of InGaN/GaN double heterostructures in the entire alloy composition," Applied Physics Letters, vol. 70, pp. 1089-1091, 1997.
- [54] I. Trainor and K. Rose, "Some properties of InN films prepared by reactive evaporation," Journal of Electronic Materials, vol. 3, pp. 821-828, 1974.

Chapitre III

Simulation des cellules solaires à base
d'InGaN, résultats et discussions

III.1 Introduction

La simulation numérique est un outil incontournable dans l'optimisation des cellules solaires et pour décrire le comportement des composants électroniques. Avant de réaliser ces dispositifs, il est essentiel de confronter les résultats d'optimisation à l'expérience, ce qui rend la simulation numérique indispensable. Les simulations numériques scientifiques reposent sur l'utilisation de modèles théoriques, souvent basés sur la technique des éléments finis. Elles permettent de modéliser mathématiquement le fonctionnement et les propriétés d'un système. Cette approche est une adaptation des méthodes de modélisation mathématique aux ressources numériques. Grâce aux interfaces graphiques, les résultats des calculs peuvent être visualisés sous forme d'images de synthèse. Dans notre étude, nous avons particulièrement examiné et simulé la structure basée sur l' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, avec une variation de largeur de la bande interdite entre 0,7 et 3,4 eV.

Le chapitre est dédié à la présentation des résultats issus des simulations numériques réalisées avec le logiciel SCAPS-1D sur des cellules solaires à base d'InGaN. Ce logiciel permet de résoudre les équations pour des structures contenant plusieurs couches semi-conductrices. Nous nous concentrons sur l'optimisation d'une structure de cellule solaire afin d'atteindre de bonnes performances et de décrire le comportement des composants électroniques. Pour ce faire, nous explorons différentes valeurs des paramètres optoélectroniques tels que les épaisseurs, la concentration du dopage et la composition (x) d'indium. Nous donnons les paramètres photovoltaïques tels que la tension en circuit ouvert (V_{co}), le courant de court-circuit (J_{cc}), le facteur de forme (FF) et le rendement de conversion photovoltaïque (η) pour chaque structure, en variant les épaisseurs, la concentration en dopant et la composition en Indium des différentes couches. Ces paramètres nous permettent de mieux comprendre et optimiser les performances de la cellule solaire.

Dans cette ultime section, nous débiterons par une présentation détaillée du logiciel SCAPS-1D, en mettant en évidence le modèle physique utilisé ainsi que les paramètres de la structure impliqués dans nos simulations. Ensuite, nous exposerons les résultats obtenus, en analysant attentivement l'impact de divers paramètres et en discutant des conclusions tirées de ces résultats.

III.2 La description du logiciel SCAPS-1D

SCAPS, connu sous le nom de "Solar cell capacitance simulator", est un logiciel de simulation unidimensionnelle de cellules solaires créé à l'origine au département d'électronique et de systèmes d'information (ELIS) de l'Université de Gand, en Belgique, sous la direction de Marc Burgelman et de ses collègues. Plusieurs chercheurs ont apporté leur contribution au développement de ce programme, notamment Alex Niemegeers, Koen Decock, Johan Verschraegen et Stefaan Degraeve [1].

Le point de fonctionnement fait référence aux paramètres non variables dans les mesures de la simulation, étant spécifiques à l'opération de mesure. Cela implique que ces paramètres restent constants et ne changent pas lors des différentes mesures effectuées au cours de la simulation, tel que :

- La température T qui joue un rôle crucial dans toutes les mesures. Pour chaque valeur de la température T , il est nécessaire de saisir manuellement les paramètres du matériau correspondant.
- Le voltage V n'est pas applicable aux simulations I-V et C-V. Il représente plutôt la tension de polarisation DC utilisée dans les simulations C-f et (λ) . Dans le logiciel SCAPS, la simulation débute toujours à 0 V et s'exécute jusqu'à la tension du point de fonctionnement en un certain nombre d'étapes, lesquelles doivent également être spécifiées.
- La fréquence f n'est pertinente que pour la simulation de la caractéristique C-V et ne s'applique pas aux simulations I-V, (λ) et C-f. Elle représente la fréquence à laquelle la caractéristique C-V est simulée.
- L'illumination joue un rôle important dans toutes les mesures. Dans le cas de la simulation de l'efficacité quantique $QE(\lambda)$, elle détermine les conditions de polarisation de la lumière. Les paramètres de base incluent le choix entre obscurité et lumière, la sélection du côté illuminé et le spectre à utiliser. Le spectre d'illumination par défaut est "one sun" ($= 1000 \text{ W/m}^2$) avec la masse d'air 1.5 global, mais il existe également une vaste gamme de lumières monochromatiques et de spectres disponibles pour des simulations personnalisées. Si un simulateur optique est disponible, il est possible de charger immédiatement un profil de génération au lieu d'utiliser un spectre prédéfini.

Cet outil de modélisation numérique est largement employé pour simuler les caractéristiques des cellules solaires. Pour intégrer une cellule solaire de manière optimale, l'utilisation de

l'interface graphique du programme est préconisée. Cette approche interactive permet d'entrer tous les paramètres nécessaires, lesquels seront ensuite contrôlés par le logiciel SCAPS afin d'éviter toute valeur impossible ou incohérente. De cette manière, les simulations restent fiables et cohérentes, assurant ainsi une analyse précise des propriétés des structures solaires.

Le logiciel SCAPS est un outil de modélisation numérique visant à simuler les propriétés des structures semi-conductrices. Le modèle est basé sur la résolution des équations de base des semi-conducteurs (équation de Poisson et équations de continuité des électrons et des trous). La fonctionnalité principale de SCAPS est de résoudre les équations unidimensionnelles. En vrac, les équations sont notées ci-dessous avec l'équation constitutive [2,3]:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon_0 \times \epsilon_r \times \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) = -q \times (p - n + N_D^+ - N_A^- + \frac{\partial \text{def}}{q}) \quad (\text{III.1})$$

$$-\frac{\partial J_n}{\partial x} - U_n + G = \frac{\partial n}{\partial t} \quad (\text{III.2})$$

$$-\frac{\partial J_p}{\partial x} - U_p + G = \frac{\partial p}{\partial t} \quad (\text{III.3})$$

Où :

Ψ : le potentiel électrostatique.

q : la charge électrique.

ϵ_0, ϵ_r : la permittivité du vide et du semi-conducteur.

n et p : la concentration en porteurs libres.

N_D^+ et N_A^- : la densité des donneurs et accepteurs ionisés.

∂def : la densité de charge des défauts.

G : le taux de génération.

J_n et J_p : la densité de courant d'électron et de trou.

∂n et ∂p : sont la distribution des électrons et des trous.

Le transport des porteurs de charge est décrit par la dérive et la diffusion est exprimée par :

$$J_n = -\frac{\mu_n \times n}{q} \times \frac{\partial E_{Fn}}{\partial x} \quad (\text{III.4})$$

$$J_p = + \frac{\mu_p \times p}{q} \times \frac{\partial E_{Fp}}{\partial x} \quad (\text{III.5})$$

Avec :

μ_n : la mobilité des électrons.

μ_p : la mobilité des trous.

Le logiciel SCAPS utilise le modèle de Poisson ainsi que l'équation de continuité avec des conditions appropriées aux interfaces et aux contacts pour obtenir un système d'équations différentielles couplées en fonction des variables (Ψ , n , p) ou (Ψ , E_{Fn} , E_{Fp}). En utilisant des méthodes numériques, le logiciel SCAPS calcule l'état stationnaire et la solution en petit signal de ce système [4].

III.3 La structure et les paramètres de la cellule solaire simulée

Dans la première partie, nous allons fournir une analyse détaillée de l'architecture de la cellule solaire qui a été étudiée et simulée. Cela inclura une description complète des différentes couches et matériaux utilisés dans la cellule solaire. Nous allons ensuite procéder à la représentation de cette structure dans le logiciel SCAPS.

Dans la deuxième partie, sont inclus les paramètres structurels essentiels utilisés dans la simulation. Ces informations sont essentielles pour comprendre le comportement et les performances de la cellule solaire sous différentes conditions d'éclairement et de température.

III.3. a) L'architecture de la cellule solaire étudiée

Notre étude se concentre sur une cellule solaire à base d'InGaN c'est une hétérojonction p-i-n en InGaN/InGaN/ZnO (de la couche tampon vers la couche fenêtre). Cette cellule est constituée d'une couche dopée P en InGaN avec une concentration N_A servant de couche tampon utilisant une concentration d'indium de 53 % donnant un gap de 1,61 eV, dans la couche active (l'absorbeur) en utilisant de l'InGaN (il est intrinsèquement dopé N) avec une concentration d'indium de 27 % donnant une largeur de bande interdite de 2,39 eV. Nous avons également employé une couche dopée N en oxyde de zinc (ZnO) avec une concentration N_D en tant que couche fenêtre.

La couche intrinsèque et la couche N (InGaN et ZnO, respectivement) font 50 nm d'épaisseur et la couche P mesure 400 nm. La figure III.1 illustre la représentation de la structure de la cellule étudiée.

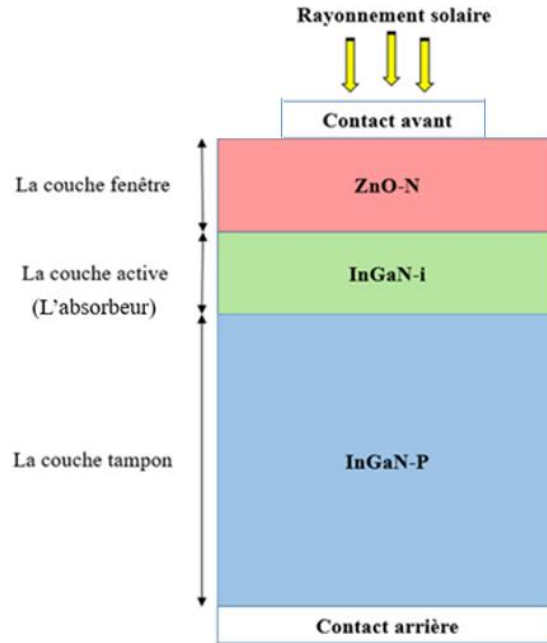


Figure III.1: La structure étudiée de type PIN de cellule solaire à base de nitrure gallium-indium $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

Dans le logiciel SCAPS, il est possible de modéliser jusqu'à sept couches semi-conductrices pour une structure photovoltaïque, en excluant les contacts avant et arrière. L'utilisation de ce logiciel s'avère très pratique car il permet de simuler diverses structures photovoltaïques en fonction des matériaux disponibles dans les fichiers data, tout en manipulant les paramètres variables tels que la largeur, la surface, le dopage, etc. Dans le cadre de notre étude, nous avons choisi de concevoir une structure PIN. Tout d'abord, nous avons décrit notre configuration de base dans le logiciel SCAPS, comme illustré dans la figure III.2 qui présente un schéma électrique de la structure à droite et les différentes couches de la cellule solaire à gauche. Ensuite, nous avons déterminé les paramètres optoélectroniques de chaque couche en effectuant des calculs numériques basés sur une recherche bibliographique approfondie.

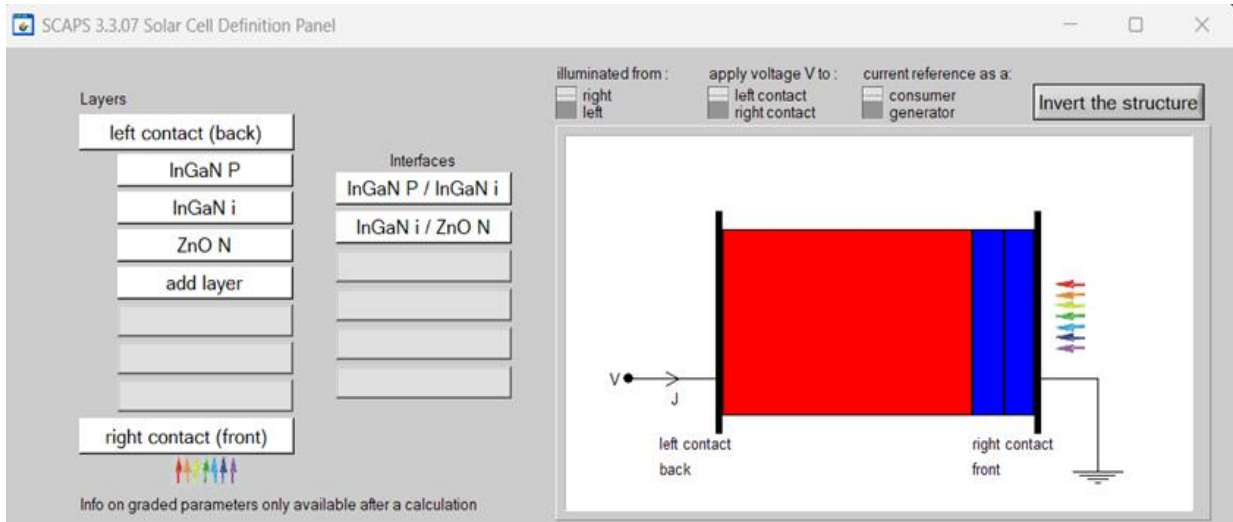


Figure III.2 : Simulation d'une cellule solaire à base d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et présentation des différentes couches.

III.3. b) Les paramètres optoélectroniques utilisées dans la simulation

Comme précisé précédemment, les alliages ternaires non polaires $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ présentent des caractéristiques attractives qui sont des candidats prometteurs pour la fabrication de cellules solaires. Pour notre étude, nous avons examiné cette structure dans des conditions standardisées (AM1.5 G, 100 mW/cm^2 , 300 K).

Afin de procéder aux calculs de simulation numérique, il est essentiel de définir les paramètres de base de la cellule solaire pour les utiliser en tant qu'entrées dans le logiciel SCAPS. Les calculs ont révélé que tous les matériaux de nitrures d'éléments III dans la phase wurtzite possèdent une largeur de bande interdite directe [5]. Les paramètres optoélectroniques de l'alliage ternaire $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ dépendent de la variable (x) ; la composition en indium (x).

Les équations et les modèles utilisés pour le calcul des différents paramètres des alliages $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ dans cette étude sont les suivants :

✓ **Valeur de la largeur de bande interdite :**

Le gap d' InGaN est déterminé à partir des gaps des composés binaires GaN et InN en utilisant la loi de Végard. Il est donné par la relation [5]:

$$E_g(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = x \times E_g(\text{InN}) + (1 - x) \times E_g(\text{GaN}) - b \times x \times (1 - x) \quad (\text{III.6})$$

Où :

$E_g(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N})$: Énergie de gap de l'InGaN.

x : la concentration de l'indium x (varie de 0 à 1)

$E_g(\text{InN}) = 0,7 \text{ eV}$.

$E_g(\text{GaN}) = 3,4 \text{ eV}$.

b : le paramètre de courbure ($b = 1,43$).

De la même manière, nous avons utilisé les paramètres optoélectroniques dans notre modélisation pour l'alliage $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, qui ont été estimés en fonction de la composition de l'Indium (x) en utilisant les équations suivantes [6] :

✓ **La permittivité relative ϵ_r**

$$\epsilon_r(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = 14,6 \times x + 10,4 \times (1 - x) \quad (\text{III.7})$$

✓ **L'affinité électronique (χ)**

$$\chi(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = 4,1 \times x + 0,7 \times (3,4 - E_g) \quad (\text{III.8})$$

✓ **La densité effective de conduction N_c**

$$N_c(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = (0,9 \times x + 2,3 \times (1 - x)) \times 10^{18} \quad (\text{III.9})$$

✓ **La densité effective de valence N_v**

$$N_v(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = (5,3 \times x + 1,8 \times (1 - x)) \times 10^{19} \quad (\text{III.10})$$

En outre, pour le calcul des mobilités des électrons (μ_n) et des trous (μ_p), nous avons employé le modèle de mobilité de Caughey-Thomas [7]. Ce modèle prend en compte la dépendance des mobilités des porteurs vis-à-vis de la densité de dopage et de l'intensité du champ électrique. Ainsi, les mobilités des électrons et des trous, μ_n et μ_p , sont données respectivement par la relation suivante:

$$\mu_{n,p}(N) = \frac{\mu_{n,p}^{\max} - \mu_{n,p}^{\min}}{1 + (N/N_{g_{n,p}})^{\gamma_{n,p}}} + \mu_{n,p}^{\min} \quad (\text{III.11})$$

Avec :

N : la densité de dopage totale.

$\gamma_{n,p}$ et $N_{g_{n,p}}$: des paramètres empiriques.

Ci-dessous est présenté le tableau III-1 indiquant les valeurs des paramètres utilisés dans l'équation (III-11) pour la modélisation de la mobilité des électrons et des trous [8].

Paramètres	GaN	InN
$\mu_n^{\min} (\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1})$	55	33
$\mu_n^{\max} (\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1})$	1000	1100
γ_n	1	1
$N_{g_n} (\text{cm}^{-3})$	2×10^{17}	8×10^{18}
$\mu_p^{\min} (\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1})$	3	3
$\mu_p^{\max} (\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1})$	170	340
γ_p	2	2
$N_{g_p} (\text{cm}^{-3})$	3×10^{17}	3×10^{17}

Tableau III-1 : Les paramètres utilisés dans l'équation (III-11) permettent de modéliser la mobilité des électrons et des trous [8].

En exploitant les informations fournies dans le tableau, nous pouvons procéder aux calculs, $\mu_{n,p}(N)$ est d'abord calculé pour les matériaux GaN et InN et les mobilités pour les couches InGaN sont ensuite interpolées linéairement pour les électrons et les trous selon les équations suivantes [9]:

$$\mu_n(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = 524 \times x + \mu_n(\text{GaN}) \quad (\text{III.12})$$

$$\mu_p(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = 6,5 \times x + \mu_p(\text{GaN}) \quad (\text{III.13})$$

Le tableau III-2 réunit les paramètres optoélectroniques spécifiques aux différentes couches de la structure utilisés dans la simulation :

Paramètres	(Couche tampon) p-InGaN	(Couche active) i-InGaN	Simulation	(Couche fenêtre) n-ZnO
Épaisseur (nm)	400	50	Varié	50
Bande interdite E_g (eV)	1,61	2,39	(III.6)	3,3
Affinité électronique χ (eV)	5,35	4,8	(III.7)	4,45
Permittivité diélectrique ϵ_r	12,46	11,45	(III.8)	9
Densité d'états efficace CB ; N_c (cm^{-3})	$1,558 \times 10^{18}$	$1,922 \times 10^{18}$	(III.9)	$2,2 \times 10^{18}$
Densité d'états efficace VB ; N_v (cm^{-3})	$3,655 \times 10^{19}$	$2,745 \times 10^{19}$	(III.10)	$1,8 \times 10^{19}$
Vitesse thermique des électrons (cm/s)	10^7	10^7	10^7	10^7
Vitesse thermique du trou (cm/s)	10^7	10^7	10^7	10^7
Mobilité des électrons μ_n ($\text{cm}^2\text{v}^{-1}\text{s}^{-1}$)	1287,72	1151,48	(III.11)	100
Mobilité des trous μ_p ($\text{cm}^2\text{v}^{-1}\text{s}^{-1}$)	184,45	182,75	(III.11)	31

Tableau III-2 : Principaux paramètres des matériaux utilisés dans la simulation.

Dans cette section, nous présenterons une étude numérique concernant la nouvelle structure proposée de p-In_xGa_{1-x}N/i-In_xGa_{1-x}N/n-ZnO.

III.4 La méthodologie d'optimisation

Le but de la simulation numérique dans cette thèse est d'améliorer les performances des cellules solaires en identifiant une configuration optimale pour leur fonctionnement. L'optimisation d'un dispositif implique la recherche de la meilleure configuration possible ou le point de fonctionnement idéal. Dans ce contexte, l'objectif est de déterminer les performances optimales de différentes cellules solaires et de mettre en évidence les paramètres qui ont le plus grand impact sur ces performances. Notre approche de modélisation consiste à identifier les variables d'optimisation, c'est-à-dire les paramètres des cellules solaires sur lesquels nous pouvons agir pour améliorer leurs performances.

La méthode d'optimisation la plus fréquemment employée pour améliorer les cellules solaires est l'optimisation paramétrique. Cette approche consiste à varier un seul des paramètres physiques ou géométriques à la fois, afin d'observer son impact sur les performances du dispositif [10]. Cette méthode met principalement en évidence l'impact significatif d'un paramètre spécifique que l'on cherche à optimiser pour maximiser les performances du dispositif. Dans le contexte l'optimisation du rendement d'une cellule solaire, permettra de déterminer comment les paramètres physiques et géométriques de la cellule influencent le rendement. Ainsi, nous identifions la valeur optimale du rendement en fonction de chaque paramètre et d'évaluer leur sensibilité respective à ces différents paramètres.

Ce type d'optimisation présente un intérêt particulier car il permet une visualisation aisée de l'influence de chaque paramètre sur le rendement de la cellule.

III.5 Discussion des résultats

Nous avons d'abord établi la structure de base de notre cellule solaire en utilisant l'InGaN comme matériau principal. Ensuite, nous avons procédé à une optimisation de certains paramètres ayant un impact significatif sur le rendement de la cellule. Notre objectif était d'atteindre un rendement optimal en utilisant le simulateur SCAPS-1D. Les simulations ont été réalisées à une température de 300 K et avec un rayonnement solaire incident de 1000 W/m² (AM 1.5 G). Nous avons commencé par simuler le modèle de base en utilisant les paramètres indiqués dans le tableau III.2. Ensuite, nous avons procédé à des variations des paramètres physiques tels que l'épaisseur, la composition en indium (x) et la concentration de dopage pour chaque couche, afin d'améliorer l'efficacité de la cellule solaire à base d'InGaN.

Par la suite, nous avons évalué les paramètres de la cellule solaire optimisée, tels que le rendement de conversion électrique (η), le facteur de forme (FF), la densité de courant de court-circuit (J_{cc}) et la tension de circuit ouvert (V_{co}). Toutes ces caractéristiques ont été soigneusement calculées dans le processus détaillé que nous présentons ci-après.

Cette analyse approfondie nous permettra de comprendre comment ces différents paramètres influencent les performances globales de la cellule solaire et est également de déterminer les valeurs optimales pour maximiser son rendement. Le tableau III-3 regroupe l'intervalle des variations des paramètres (les épaisseurs, les dopages et la concentration x de l'indium (In)) pour chaque couche de la cellule solaire en respectant toujours les limites physiques.

Paramètres	La couche tampon (p-In _x Ga _{1-x} N)	La couche active (i-In _x Ga _{1-x} N)	La couche fenêtre (n-ZnO)
La variation des épaisseurs (nm)	[200-4000]	[50-1650]	[10-400]
La variation du dopage (cm ⁻³)	[10 ¹⁵ -10 ¹⁹]	[7×10 ¹⁷ -10 ¹⁹]	[10 ¹⁵ -10 ¹⁹]
La variation de la composition x d'In	[0,48-0,58]	[0,27-0,33]	

Tableau III-3 : La variation des paramètres utilisés dans l'optimisation pour la couche tampon, active et fenêtre.

III.5.1 L'optimisation de la couche active (l'absorbeur)

III.5.1.a) La variation de l'épaisseur de la couche active

Tout d'abord, en partant du modèle initial, nous avons optimisé l'épaisseur de la couche active (In_xGa_{1-x}N), de la structure illustrée dans la figure III.1, en la faisant varier son épaisseur de 50 à 1650 nm avec N_D=10¹⁸ cm⁻³ et x = 0,27. Les résultats des paramètres de la cellule (η, FF, J_{cc}, V_{co}) en fonction de ces épaisseurs sont présentés dans la figure III.3.

La figure III.3 fournit une représentation graphique montrant la relation de proportionnalité entre les paramètres importants d'une cellule solaire (η, FF, J_{cc}, V_{co}) et l'épaisseur de sa couche active. Cette relation couvre un large éventail de valeurs, allant jusqu'à une épaisseur de 1650 nm. L'observation intéressante réside dans le fait qu'au-delà de cette épaisseur de 1450 nm, on remarque une légère augmentation des paramètres photovoltaïques de la cellule solaire, notamment le rendement et le facteur de forme. À une épaisseur de 1450 nm, les valeurs de la densité de courant et de la tension atteignent respectivement 20,7 mA/cm² et 1,191 V. Cette amélioration du rendement peut être attribuée à une meilleure absorption des photons par la couche active, ce qui augmente le nombre de paires électron-trou générées.

Cependant, il est essentiel de noter que si l'épaisseur de la couche active devient trop importante, un problème de recombinaison des charges photogénérées peut survenir avant qu'elles ne soient collectées. Cela peut entraîner une diminution des performances globales de la cellule solaire malgré l'augmentation initiale du rendement.

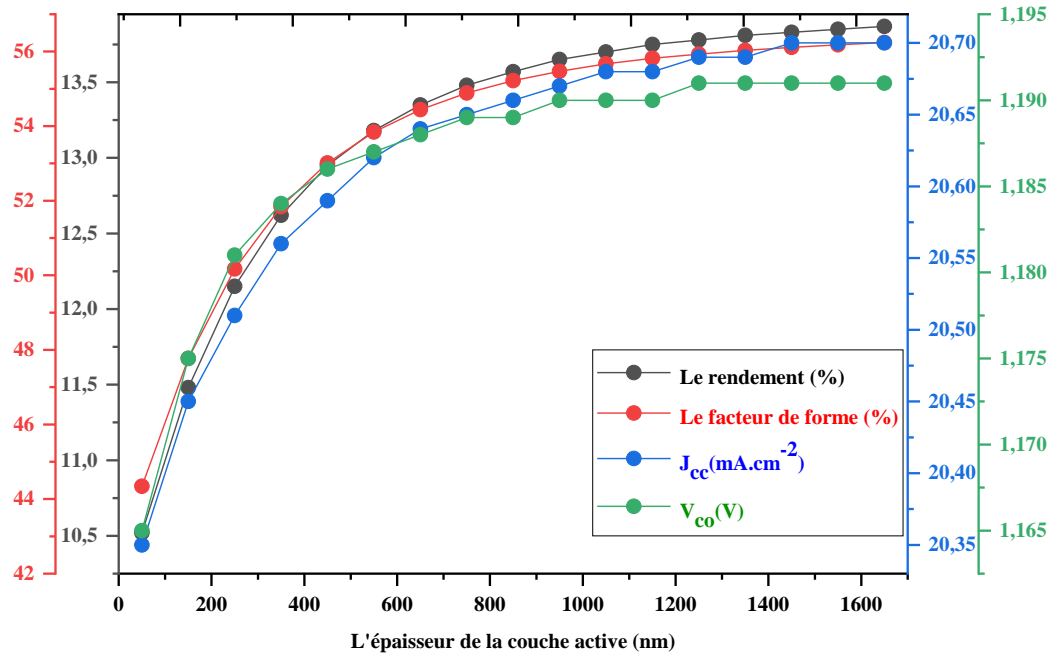


Figure III.3 : Le rendement, le facteur de forme, le courant de court-circuit et la tension de circuit ouvert en fonction de l'épaisseur de la couche active ($i\text{-In}_{0,27}\text{Ga}_{0,73}\text{N}$).

Il est donc important de prendre en compte ces observations dans des applications spécifiques, telles que dans le domaine spatial, où un rendement (l'efficacité énergétique) optimal est primordial. Pour de telles applications, une épaisseur d'environ 1450 nm peut être privilégiée pour tirer parti de l'amélioration du rendement sans être affecté par des effets négatifs de recombinaison. À cette épaisseur optimale, un rendement de 13,83 % peut être atteint, ce qui est crucial pour garantir l'efficacité énergétique et les performances de la cellule solaire dans un environnement spatial exigeant.

III.5.1.b) La variation du dopage dans l' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ de la couche active

Ainsi, le paramètre suivant présente la variation de la concentration en dopage de type N de la couche active. Nous avons fait varier le dopage N_D entre $7 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et 10^{19} cm^{-3} avec une épaisseur optimale de 1450 nm et la concentration de l'In est de $x = 0,27$. Les mesures électriques sur les nitrures montrent une forte concentration d'électrons, généralement de l'ordre de 10^{18} cm^{-3} , leur conférant un caractère intrinsèquement de type N [11,12].

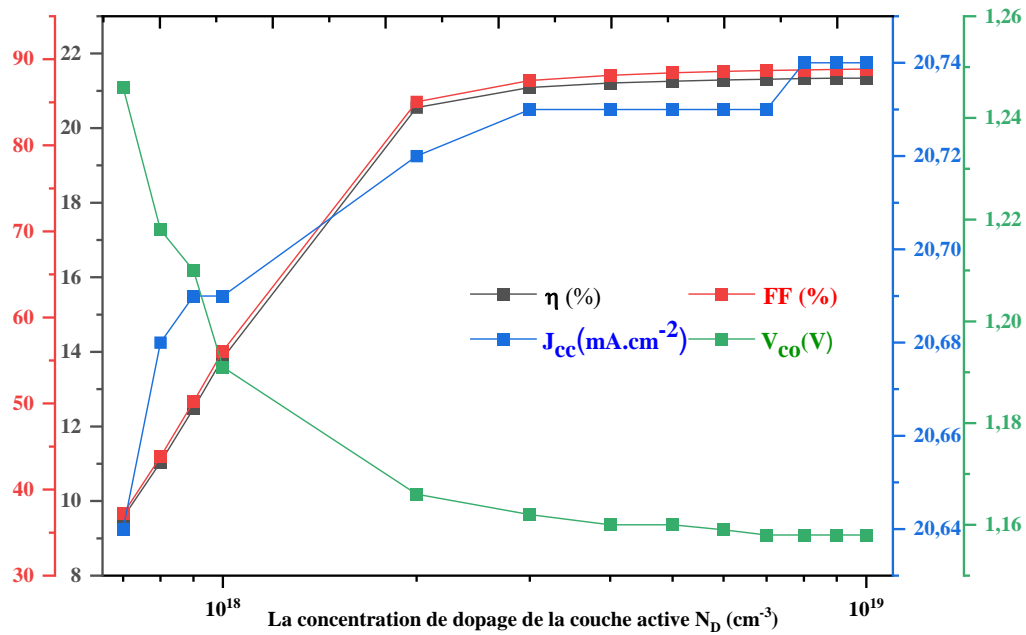


Figure III.4 : la variation des paramètres de la cellule (η , FF, J_{cc} , V_{co}) en fonction de la concentration de dopage de la couche active.

Dans la figure III.4, nous observons une tendance claire concernant le rendement de la cellule en fonction de la variation de la concentration de dopant. Initialement, à mesure que la concentration de dopant augmente, le rendement de la cellule solaire augmente également. Cette tendance se poursuit jusqu'à une concentration de $N_D = 3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, point où le rendement atteint sa valeur maximale de 21,09 %. Cette concentration semble être optimale pour obtenir le rendement de conversion d'énergie le plus élevé dans la cellule solaire. Au-delà de la concentration de dopage de $N_D = 3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, le rendement devient quasi constant. Cela suggère qu'augmenter davantage la concentration de dopant au-delà de ce point n'améliore pas de manière significative le rendement de conversion d'énergie de la cellule solaire.

De plus, d'autres paramètres importants de la cellule solaire sont affectés par la variation de la concentration de dopant. Le facteur de forme, la densité de courant et la tension en circuit ouvert diminuent avec l'augmentation de la concentration de dopage. Cela indique qu'il existe des compromis entre ces paramètres et l'efficacité de la cellule solaire. À mesure que la concentration de dopant augmente, certaines des caractéristiques électriques de la cellule

changent, entraînant des variations dans ces paramètres. Il est important de noter que le rendement de conversion connaît une amélioration significative de 9 % à 21 % à mesure que la concentration de dopant augmente. Cela met en évidence le rôle important du dopage dans la couche absorbante de la cellule solaire. La raison de cet effet notable est liée à la génération d'un fort champ électrique au niveau de la jonction p-InGaN/i-InGaN suite à l'augmentation du dopage. Ce champ électrique facilite la séparation et le déplacement des porteurs de charge, ce qui entraîne une amélioration des performances et de l'efficacité globale de la cellule solaire.

III.5.1.c) La variation de la concentration de l'indium

Par la suite, nous avons amélioré la composition en indium (x) de la couche active ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$), ce qui nous a permis de faire varier la largeur de la bande interdite entre 2,19 eV et 2,39 eV. La figure III-5 illustre comment les paramètres de la cellule (η , FF, V_{co} , I_{cc}) évoluent en fonction des variations de la composition en indium (x) de la couche active.

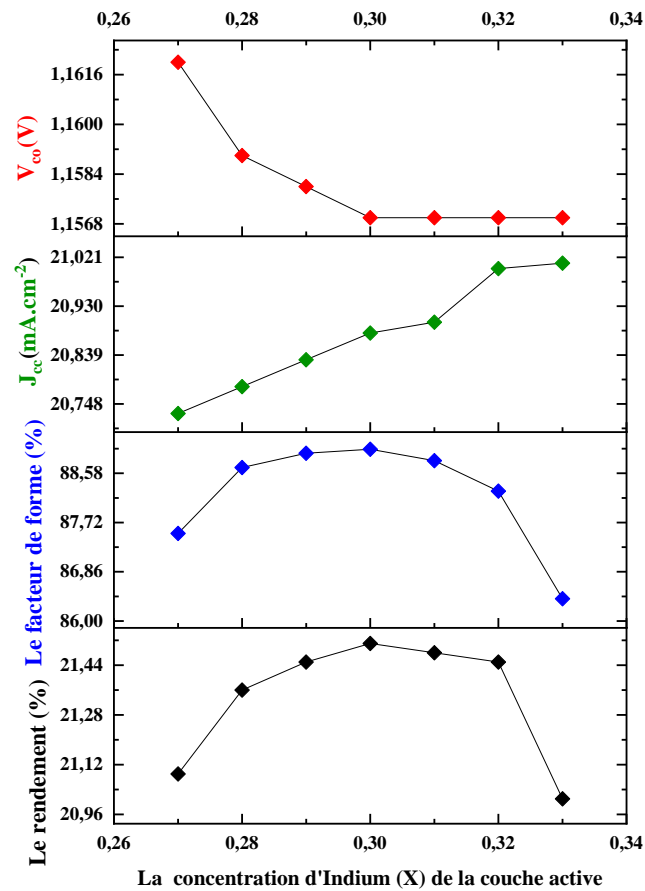


Figure III.5 : Les paramètres de la cellule (Le rendement, le facteur de forme, le courant de court-circuit et la tension à vide) en fonction de la concentration (x) d'indium de la couche active.

Dans notre étude, nous avons examiné la variation de la composition de l'indium (x) dans une plage allant de 0,27 à 0,33. Cette plage a été choisie pour obtenir des résultats significatifs lors de la simulation. En analysant les données présentées dans la figure III-5, nous avons observé une tendance intéressante ; le rendement augmente légèrement jusqu'à ce que la composition atteigne $x = 0,3$ à 21,52 %, et puis il diminue légèrement après ce point, affectant à la fois le facteur de forme et les performances globales du dispositif. Malgré cette diminution, nous avons noté que le courant de court-circuit et la tension de circuit ouvert demeurent relativement stables dans toute la plage de composition étudiée. Cela suggère que ces deux paramètres essentiels du dispositif photovoltaïque ne sont pas affectés de manière significative par les variations de composition de l'indium. En synthèse, nos résultats soulignent l'importance cruciale de choisir avec soin l'espacement de la couche active dans ce type de dispositif. Les variations de la composition de l'indium peuvent considérablement affecter le rendement et les performances globales du dispositif. Cependant, en surveillant attentivement le courant de court-circuit et la tension de circuit ouvert, nous avons la possibilité d'optimiser les performances en ajustant ce paramètre critique d'espacement de la couche active. Ces conclusions revêtent une importance essentielle pour orienter la conception et l'optimisation des dispositifs photovoltaïques afin d'atteindre des performances optimales.

III.5.2 L'optimisation de la couche tampon

III.5.2.a) La variation de l'épaisseur de la couche tampon

Nous avons déterminé les valeurs optimales pour la couche active, y compris son épaisseur de 1450 nm, la concentration de dopage $N_D = 3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et la composition d'indium ($x = 0,3$) et ensuite nous avons fait varier l'épaisseur de la couche tampon de 200 à 4000 nm.

La figure III.6 montre que lorsque l'épaisseur de la couche tampon augmente, le rendement et le courant de court-circuit (J_{cc}) augmentent légèrement jusqu'à atteindre une stabilité presque complète à partir d'une épaisseur de 3000 nm. En revanche, le facteur de forme (FF) et la tension de circuit ouvert (V_{co}) restent pratiquement constants avec des valeurs de 89 % et 1,1 V respectivement, présentant une faible variation. Par conséquent, il n'est pas nécessaire de développer des absorbeurs au-delà de 3000 nm, car cela n'apporte pas d'amélioration significative. Cependant, il est important de noter un défaut structurel majeur qui se produit lorsque l'épaisseur de la couche tampon se situe entre 2000 nm et 4000 nm. Dans cette plage, le champ électrique à la jonction est faible, entraînant un faible potentiel induit. Cela limite

l'efficacité globale de la cellule solaire. Ainsi, l'épaisseur de la couche tampon joue un rôle critique dans les performances du dispositif.

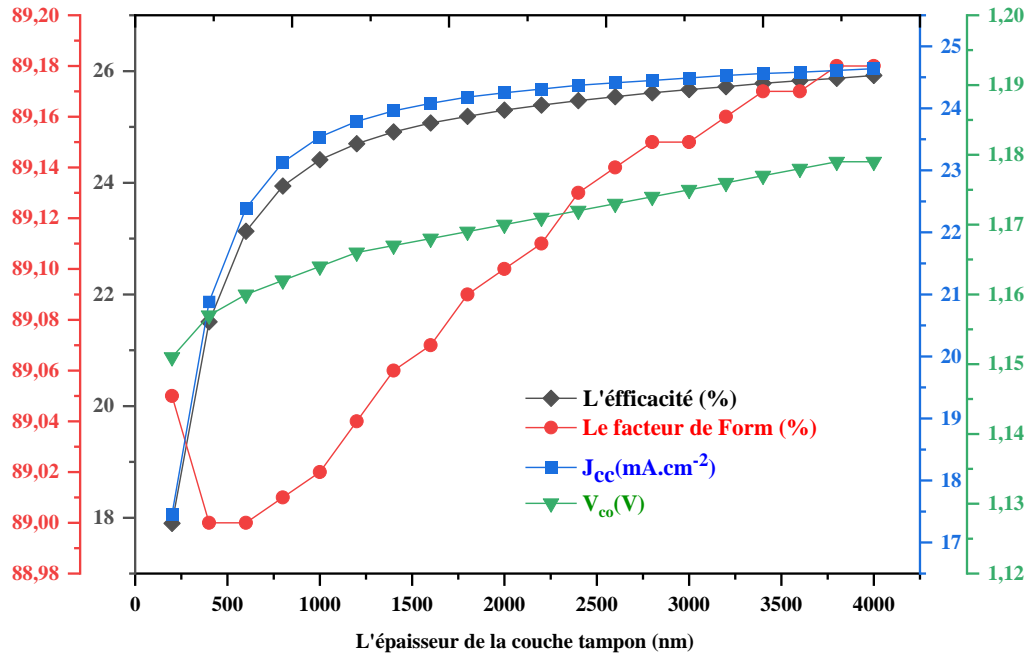


Figure III.6 : La variation de η , J_{cc} , FF et V_{co} en fonction de l'épaisseur de la couche tampon.

En résumé, les résultats de la figure III.6 mettent en évidence l'importance de choisir judicieusement l'épaisseur de la couche tampon. Une épaisseur optimale d'environ 3000 nm permet d'atteindre un rendement $\eta = 25,6\%$ et un $J_{cc} = 24,5\%$ stables, tandis que des épaisseurs supérieures n'apportent pas d'avantages significatifs et peuvent entraîner des défauts structurels nuisibles aux performances du dispositif. Ainsi, pour optimiser les performances globales, il est essentiel de prendre en compte ce paramètre critique lors de la conception de la cellule solaire.

III.5.2.b) La variation du dopage dans l' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ de la couche tampon

Dans cette section, nous avons examiné comment la concentration de dopage dans la couche tampon, dopée de type p, influence les paramètres de la cellule solaire tels que l'efficacité (η), le facteur de remplissage (FF), le courant de court-circuit (J_{cc}) et la tension en circuit ouvert (V_{co}). Pour ce faire, nous avons effectué des variations de dopage dans la plage de 10^{15} à 10^{19}

cm^{-3} en fixant les paramètres optimums obtenus de la couche active et l'épaisseur optimale de la couche tampon de 3000 nm avec $x = 0,53$.

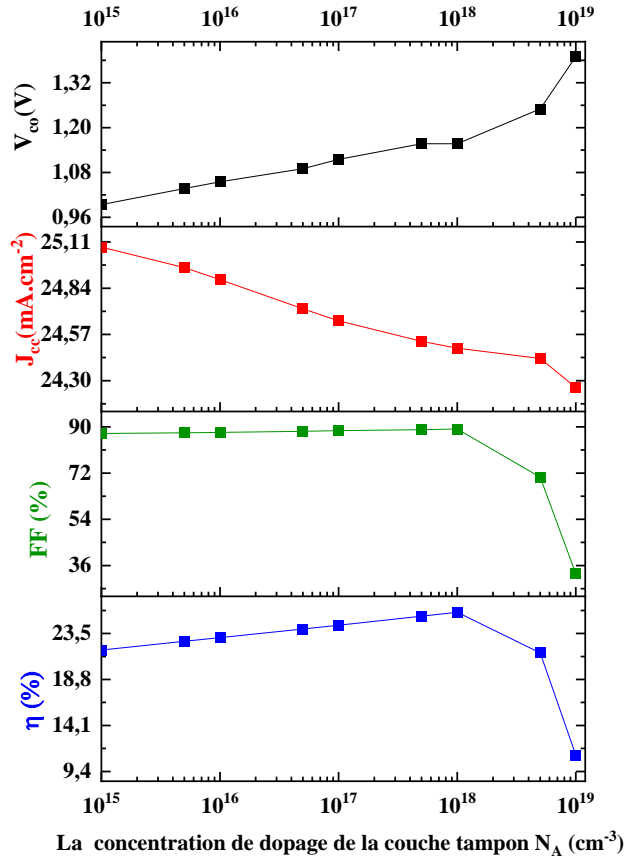


Figure III.7 : Les paramètres photovoltaïques de la cellule (η , FF, J_{cc} , V_{co}) en fonction de la concentration de dopage de la couche tampon.

Dans la figure III.7, les résultats montrent une relation intéressante entre la concentration de dopage dans la couche tampon dopée de type p et les performances de la cellule solaire.

- Le rendement de conversion de l'énergie de la cellule solaire est étudié en fonction de la concentration de dopage de la couche tampon. On observe que lorsque la concentration de dopage augmente, le rendement de conversion augmente également. Cette augmentation se poursuit jusqu'à atteindre une concentration de dopage d'environ $N_A=10^{18} \text{ cm}^{-3}$. On constate que c'est une concentration de dopage idéale pour obtenir le rendement de conversion le plus élevé. À cette concentration, la cellule solaire atteint un rendement de conversion de l'énergie de 25,67 %. Cela signifie que la cellule peut convertir 25,67 % de l'énergie lumineuse qu'elle reçoit en électricité, ce qui est un résultat significatif pour l'efficacité de la cellule solaire.

- Le facteur de forme : est un paramètre important qui caractérise la forme de la courbe courant-tension de la cellule solaire. Il est lié aux pertes internes et peut influencer l'efficacité globale de la cellule. Dans ce cas, on remarque que le facteur de forme reste pratiquement constant à la concentration de dopage optimale de 10^{18} cm^{-3} . Cela signifie que, même avec une augmentation de la concentration de dopage, le facteur de forme ne subit pas de changements significatifs. Ces résultats sont essentiels pour optimiser la conception et les performances des cellules solaires dopées de type p.

III.5.2.c) La variation de la concentration de l'indium

La figure III.8 présente une analyse détaillée des variations des paramètres de la cellule en fonction de la composition en indium (x) de la couche tampon. Pour effectuer cette analyse, nous avons fait varier la concentration d'indium dans la plage allant de $x = 0,48$ à $x = 0,58$ avec un dopage de $N_A=10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et une épaisseur de 3000 nm.

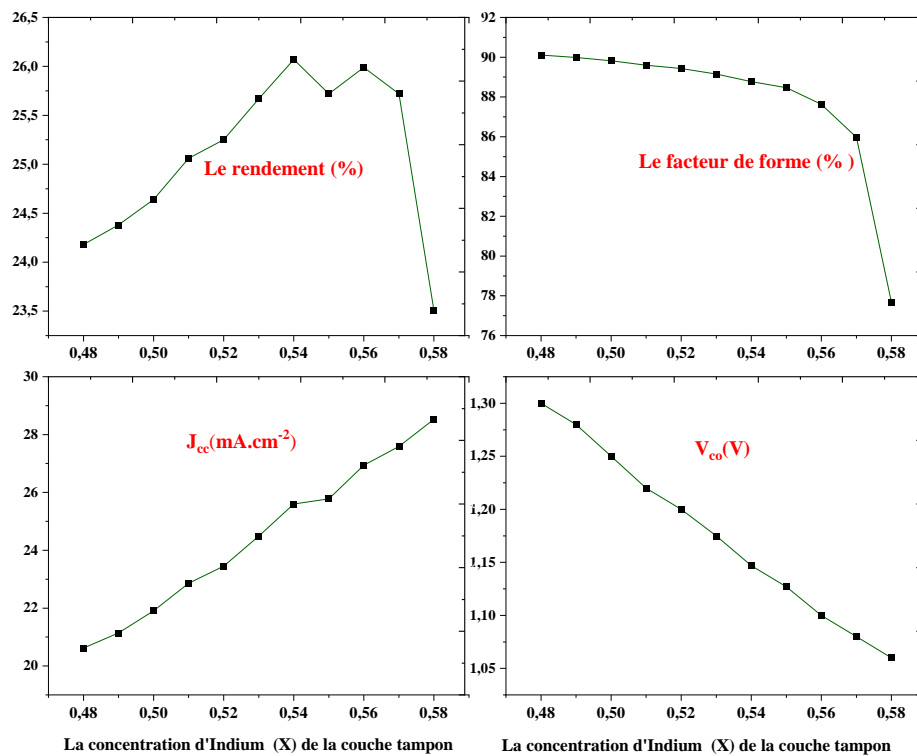


Figure III.8 : La variation de rendement, de facteur de forme, de courant de court-circuit et de la tension de circuit ouvert en fonction de la composition x d'indium de la couche tampon.

Au cours de cette variation de composition, nous avons remarqué que les résultats les plus performants ont été obtenus lorsque la valeur de $x = 0,54$ donnant un rendement de 26 %. Cela signifie que la cellule photovoltaïque a atteint son rendement le plus élevé et ses performances optimales avec cette concentration spécifique d'indium dans la couche tampon. Alors, La composition de l'indium de la couche tampon est un paramètre critique.

III.5.3 L'optimisation de la couche fenêtre de ZnO

III.5.3.a) La variation du dopage de ZnO

L'optimisation de la couche fenêtre n-ZnO a été réalisée en utilisant les valeurs optimales de la couche tampon ($\text{ép} = 3000 \text{ nm}$, $N_A = 10^{18} \text{ cm}^{-2}$, $x = 0,54$) et de la couche active ($\text{ép} = 1450 \text{ nm}$, $N_D = 3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-2}$, $x = 0,3$) avec une épaisseur de la couche fenêtre de 50 nm. Nous avons fait varier la concentration de dopage de $N_D = 10^{15}$ jusqu'à $N_D = 10^{19}$. La figure III.9 présente une relation intéressante entre la concentration de dopage et deux paramètres clés : l'efficacité et le facteur de forme d'un dispositif donné. Lorsque la concentration de dopage augmente, ces deux paramètres connaissent une amélioration significative, atteignant un niveau maximal lorsque la conversion atteint 26 % pour une concentration de 10^{18} cm^{-3} . Cela signifie qu'une concentration de dopage élevée peut augmenter l'efficacité globale et la performance du dispositif. Le courant de court-circuit et la tension de circuit ouvert, restent relativement stables. Cela suggère que ces deux caractéristiques ne sont pas sensibles aux changements de dopage et qu'ils conservent des valeurs constantes tout au long de la plage de concentration examinée. La figure III.9 met en évidence l'impact positif de la concentration de dopage sur l'efficacité et le facteur de forme.

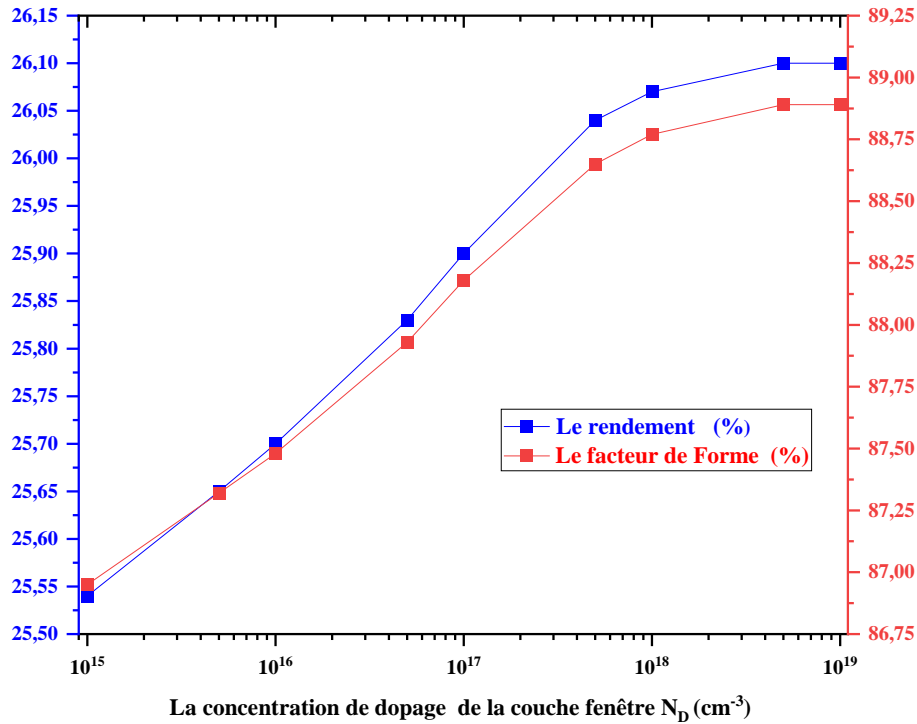


Figure III.9 : Variation de concentration de dopage N_D (cm^{-3}) de la couche fenêtre avec une épaisseur de 50 nm.

III.5.3.b) La variation de l'épaisseur de la couche fenêtre de ZnO

Au cours de cette étape de l'étude, nous avons effectué une variation de l'épaisseur de la couche fenêtre dans une plage allant de 10 nm à 400 nm avec un dopage de 10^{18} cm^{-3} . Les résultats obtenus et présentés dans la figure 10 révèlent une relation importante entre l'épaisseur de la couche fenêtre et deux facteurs cruciaux : l'absorption des photons et la captation du courant. L'analyse de la figure III.10 met en évidence un optimum autour d'une épaisseur de 10 nm, ce qui correspond au point où un compromis idéal est atteint entre l'absorption efficace des photons et la captation maximale du courant électrique. En d'autres termes, une couche fenêtre d'environ 10 nm d'épaisseur permet d'assurer une absorption suffisante de photons pour générer des charges électriques tout en optimisant la captation du courant généré, conduisant ainsi à des performances optimales du dispositif étudié, donnant un rendement de 26,11 %.

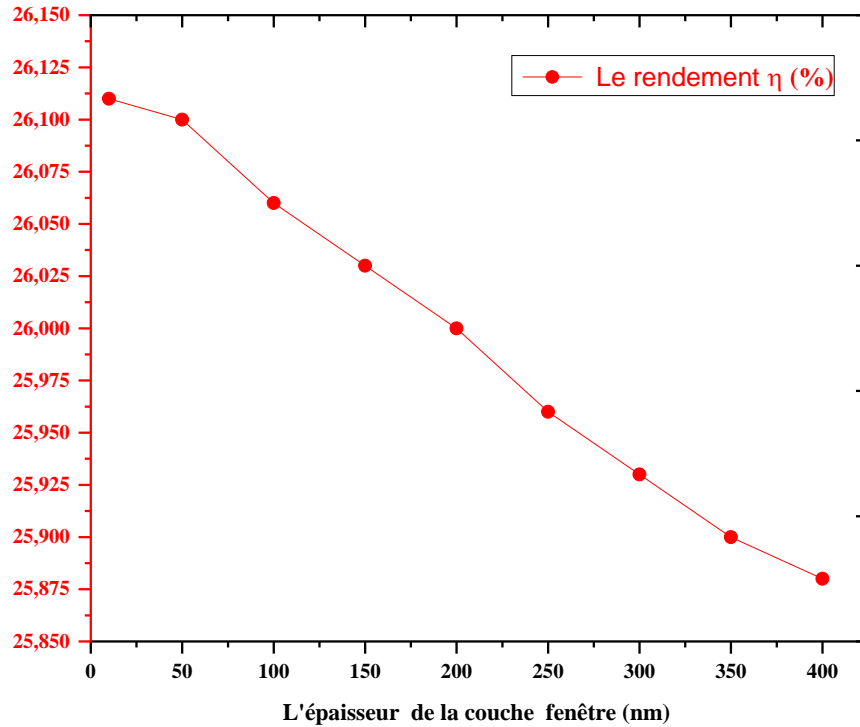


Figure III.10 : Le rendement en fonction de l'épaisseur de la couche fenêtre (ZnO) avec

$$N_D = 10^{18} \text{ cm}^{-3}.$$

III.6 Discussions

Pour améliorer les performances de la cellule solaire à base d'InGaN, Nous avons mené une série d'expériences et d'optimisations sur trois paramètres clés : l'épaisseur des couches, la concentration de dopage et la composition en indium (x) de l'absorbeur et de la couche tampon. Les résultats obtenus montrent une augmentation remarquable de l'efficacité, passant de 10,52 % à 26,11 %, ce qui représente une amélioration de plus de 100 % par rapport à la structure de base. La différence d'efficacité entre la structure de base et la structure optimisée est de 16 %. Des performances significatives ont été obtenues en ajustant certains paramètres essentiels de l'absorbeur de la cellule solaire ; une épaisseur de 1450 nm a été identifiée comme optimale, permettant une absorption maximale de la lumière solaire tout en facilitant le transport efficace des porteurs de charge. En dopant le matériau InGaN avec une concentration de $N_D = 3 \times 10^{18}$, la mobilité des porteurs de charge a été améliorée, ce qui a conduit à une meilleure séparation des électrons et des trous, réduisant ainsi les pertes de charge et améliorant

l'efficacité globale. De plus, une concentration d'indium $x = 0,3$ dans la couche active a permis une correspondance optimale avec le spectre solaire, augmentant ainsi la capture de la lumière solaire sur une large gamme de longueurs d'onde. Les résultats de simulation, présentés à la figure III.11, représentent les courbes caractéristiques de la cellule solaire optimisée, montrant l'efficacité améliorée par rapport à la structure de base. Ces données peuvent servir de référence pour évaluer les performances de la cellule solaire et fournir des indications supplémentaires pour d'autres améliorations potentielles.

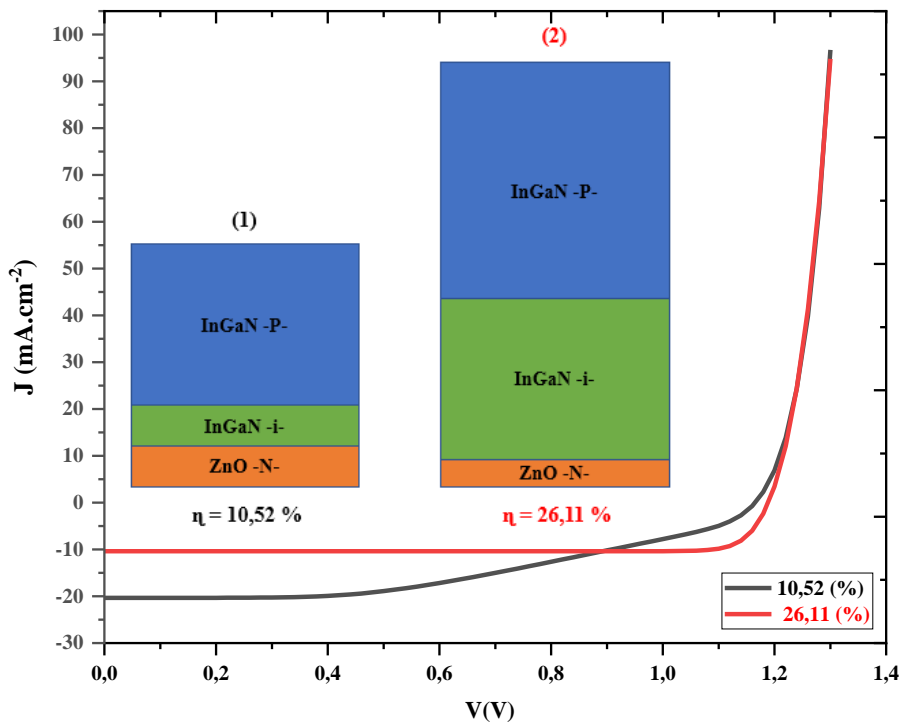


Figure III.11 : Les caractéristiques courant-tension de la structure d'entrée (1) et la structure optimisée (2) à base d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

Le tableau III.4 regroupe les paramètres de la cellule pour les deux structures différentes, notamment le rendement η , le facteur de forme FF, le courant de court-circuit I_{cc} et la tension de circuit ouvert V_{co} .

Structure (1)	$\eta = 10,52 \%$	FF = 44,34 %	$I_{cc} = 20,35 \text{ mA/cm}^2$	$V_{co} = 1,165 \text{ V}$
Structure (2)	$\eta = 26,11 \%$	FF = 88,89 %	$I_{cc} = 25,6 \text{ mA/cm}^2$	$V_{co} = 1,147 \text{ V}$

Tableau III-4 : Le rendement η , le facteur de forme FF, le courant de court-circuit I_{cc} et la tension de circuit ouvert V_{co} pour les deux structures.

Le tableau III-5 regroupe les paramètres optimaux obtenus après l'optimisation, ainsi que les propriétés optoélectroniques associées aux a ces paramètres.

Paramètres	In_{0,54}Ga_{0,46}N -p	In_{0,3}Ga_{0,7}N-i	ZnO-n
Épaisseur (nm)	3000	1450	10
Largeur de bande interdite (eV)	1,58	2,29	3,3
Affinité électronique (eV)	5,37	4,87	4,45
Permittivité diélectrique	12,506	11,57	9
Densité d'états efficace CB (cm ⁻³)	$1,544 \times 10^{18}$	$1,88 \times 10^{18}$	$2,2 \times 10^{18}$
Densité d'états efficace VB (cm ⁻³)	$3,69 \times 10^{19}$	$2,85 \times 10^{19}$	$1,8 \times 10^{19}$
Vitesse thermique des électrons (cm/s)	10^7	10^7	10^7
Vitesse thermique du trou (cm/s)	10^7	10^7	10^7
Mobilité des électrons (cm ² v ⁻¹ s ⁻¹)	1293	1177	100
Mobilité des trous (cm ² v ⁻¹ s ⁻¹)	184,5	271,9	31
La densité des donneurs N _D (cm ⁻³)		3×10^{18}	1×10^{18}
La densité des accepteurs N _A (cm ⁻³)	1×10^{18}		

Tableau III-5 : Les paramètres de base obtenus pour cette simulation.

Conclusion :

Dans ce dernier chapitre, des simulations numériques ont été effectuées sur une cellule solaire utilisant une composition d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et simulée avec le logiciel SCAPS-1D. Cette cellule solaire présente une nouvelle structure avec une couche tampon et une couche active principalement constituées de nitrure de gallium-indium, tandis que la couche fenêtre est composée d'oxyde de zinc p- $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{i-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{n-ZnO}$. Les simulations ont visé à optimiser les paramètres optoélectroniques pour améliorer les performances de la cellule solaire.

Tout d'abord, nous avons décrit le logiciel SCAPS-1D, exposant la structure et les paramètres optoélectroniques utilisés dans notre simulation. Ensuite, nous avons expliqué notre méthodologie d'optimisation, en optant pour une approche d'optimisation paramétrique dans la simulation. Nous avons discuté des résultats obtenus pour différentes configurations et enfin, nous avons comparé la structure de base avec la structure optimisée.

Les résultats des simulations indiquent que les meilleures performances sont obtenues avec une épaisseur de couche active de 1450 nm, un dopage n à une concentration de $N_D=3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et une teneur en indium de 30 %, avec épaisseur de couche tampon de 3000 nm, un dopage n à une concentration $N_A=10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et une teneur en indium de 54 % et l'épaisseur de la couche fenêtre de 10 nm avec un dopage de $N_D=10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Cette configuration a permis d'atteindre une efficacité énergétique de 26,11%. Ces résultats sont prometteurs et suggèrent que les simulations numériques présentées dans cette thèse pourraient être utiles pour guider des études expérimentales sur les cellules solaires et pour améliorer leurs performances.

En conclusion, il est clair que les paramètres de chaque couche jouent un rôle crucial dans la performance globale de l'appareil, en particulier pour l'amélioration de l'efficacité de conversion des cellules solaires.

Références du chapitre III:

- [1] A. Niemegeers, M. Burgelman, K. Decock, J. Verchraeag, S. Degrave, "SCAPS 3201 Manual", ELIS, (2013).
- [2] Mostefaoui, M., Mazari, H., Khelifi, S., Bouraiou, A., Dabou, R., "Simulation of high efficiency CIGS solar cells with SCAPS-1D software". Energy Procedia 74, 736–744 (2015).
- [3] Movla, H.: "Optimization of the CIGS based thin film solar cells: Numerical simulation and analysis". Optik.125, 67–70 (2014).
- [4] O.K. Simya, A. Mahaboobatcha, K. Balachander, "A comparative study on the performance of Kesterite based thin film solar cells using SCAPS simulation program", Superlattices and Microstructures (2015), doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.spmi.2015.02.020>.
- [5] Anani, Macho, et al. "High-grade efficiency III-nitrides semiconductor solar cell." Microelectronics journal 40.3 (2009): 427-434.
- [6] Benmoussa D, Hassane B, Abderrachid H. "Simulation of $\text{In}_{0.52}\text{Ga}_{0.48}\text{N}$ solar cell using AMPS-1D". 2013 International Renewable and Sustainable Energy Conference (IRSEC).2013.
- [7] D. M. Caughey et R. E. Thomas, "Carrier mobilities in silicon empirically related to doping and field", Proc. IEEE, vol. 55, no 12, p. 2192-2193, 1967, doi: 10.1109/PROC.1967.6123.
- [8] V. Gorge et al., "Theoretical analysis of the influence of defect parameters on photovoltaic performances of composition graded InGaN solar cells", Materials Science and Engineering: B, vol. 178, no 2, p. 142-148, févr. 2013, doi: 10.1016/j.mseb.2012.10.033.
- [9] Muhammad Nawaz^{1, 3} and Ashfaq Ahmad², "A TCAD-based modeling of GaN/InGaN/Si solar cells"; journal of SEMICONDUCTOR SCIENCE AND TECHNOLOGY; 2012.
- [10] Abdoulwahab Adaine. "Optimisation numérique de cellules solaires à très haut rendement à base d'InGaN" Thèse de doctorat. Science des matériaux [cond-mat.mtrl-sci]. Université de Lorraine, 2018. Français.
- [11] Donmez, O., et al. "High carrier concentration induced effects on the bowing parameter and the temperature dependence of the band gap of $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$ ". Journal of Applied Physics. 2011, Vol. 110,103506.
- [12] Wu, J. "When group-III nitrides go infrared: new properties and perspectives". Journal of Applied Physics. 2009, Vol. 106, 011101.

Notre contribution au développement de la cellule solaire à base d'InGaN consistait à améliorer de manière significative ses performances en ajustant des paramètres cruciaux grâce à l'utilisation du logiciel SCAPS-1D. L'objectif était d'atteindre une efficacité maximale. L'alliage InGaN est l'objet d'études depuis de nombreuses années, en particulier dans le domaine des dispositifs optoélectroniques, notamment ceux destinés à la conversion photovoltaïque. Les matériaux semi-conducteurs basés sur l'alliage InGaN sont porteurs d'un potentiel révolutionnaire pour l'industrie photovoltaïque. Ces matériaux se distinguent par leurs caractéristiques exceptionnelles qui les prédisposent à être à l'origine d'une avancée significative : un coefficient d'absorption extrêmement élevé couvrant l'ensemble du spectre solaire, des niveaux de mobilité des porteurs de charge élevés, des masses effectives relativement réduites, une bande interdite s'étendant sur l'ensemble du spectre visible, du proche infrarouge (avec un écart de 0,77 eV pour l'InN) à l'ultraviolet (avec un écart de 3,4 eV pour le GaN), ainsi qu'une exceptionnelle résistance aux radiations et autres conditions environnementales extrêmes.

Le premier chapitre de ce mémoire se consacre à une exploration détaillée des matériaux III-N, incluant une description de leurs caractéristiques physiques et de leurs principales applications. Une analyse approfondie de leurs propriétés structurales, électriques, électroniques et optiques a été entreprise. Une attention particulière a été portée à la fabrication des nitrures des éléments III, avec une mise en exergue du nitrure gallium-indium. L'accent a été mis sur le rôle central de l'alliage InGaN dans l'innovation de nouveaux composants électroniques et optoélectroniques, avec un intérêt particulier porté aux domaines des diodes et des cellules solaires. L'étude a mis en lumière les avantages et les applications prometteuses de cet alliage dans ces domaines spécifiques.

Le deuxième chapitre de ce mémoire traite de la technologie photovoltaïque. Il débute en offrant une description détaillée des cellules photovoltaïques, en explorant leur mécanisme de fonctionnement, l'effet photovoltaïque, et en présentant le schéma électrique équivalent d'une cellule solaire. Ensuite, nous nous penchons sur les caractéristiques électriques des cellules photovoltaïques, en mettant particulièrement l'accent sur les différentes technologies de cellules solaires basées sur le nitrure de gallium-indium réalisées par des travaux précédents. Enfin, nous analysons les avantages et les défis associés à l'utilisation du nitrure de gallium-indium dans le contexte des cellules photovoltaïques, tout en mettant en évidence l'objectif de cette thèse.

Le chapitre final se consacre à une analyse détaillée des simulations numériques effectuées sur une cellule solaire qui utilise une composition d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et qui a été simulée à l'aide du logiciel SCAPS-1D. Cette cellule solaire présente une nouvelle structure, comprenant une couche tampon et une couche active principalement constituées de nitrure gallium-indium, tandis que la couche fenêtre est composée d'oxyde de zinc $\text{p-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{i-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{n-ZnO}$. Les simulations avaient pour objectif d'optimiser les paramètres optoélectroniques tels que l'épaisseur, le dopage et la concentration de l'indium (x) dans le but d'améliorer les performances de la cellule solaire (26,11 %). Ce chapitre marque une étape essentielle dans la recherche visant à améliorer les performances des cellules solaires.

En conclusion, cette thèse s'insère dans le processus de développement d'une cellule solaire, avec un accent particulier sur l'identification et l'optimisation des paramètres cruciaux, cette approche de modélisation consiste à identifier les variables d'optimisation, c'est-à-dire les paramètres des cellules solaires sur lesquels nous pouvons agir pour améliorer leurs performances, il suffit de varier un seul des paramètres physiques ou géométriques à la fois, afin d'observer son impact sur le rendement et les performances du dispositif. Les résultats obtenus sont remarquables, avec une amélioration significative du rendement de la cellule, passant de 10,52 % à 26,11 %. Cette augmentation de plus de 100 % par rapport à la structure de base témoigne du succès des efforts déployés pour optimiser les performances de la cellule solaire.

En termes de perspectives futures, il est impératif de conduire une étude expérimentale complémentaire visant à obtenir une meilleure compréhension des propriétés optiques des diverses couches impliquées. Cette démarche s'avère essentielle pour permettre une comparaison approfondie entre les résultats théoriques et les données issues de la pratique.

Résumé

$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en tant qu'alliage semi-conducteur de nitrure est prometteur pour les dispositifs optoélectroniques modernes. Il a suscité une attention considérable ces dernières années. Cependant, en raison de sa puissante modulation de la bande interdite d'énergie allant des UV au spectre visible (0.7, 3.4 eV) et de son coefficient d'absorption intéressant pouvant varier de 10^3 à 10^5 cm^{-1} , il peut être considéré comme un candidat potentiel pour les cellules solaires à haute efficacité. Nous avons réalisé, dans le cadre de ce travail, une modélisation de dispositif et une simulation numérique à l'aide du logiciel SCAPS-1D. Nous avons optimisé les caractéristiques photovoltaïques d'une cellule solaire principalement composée de semi-conducteurs de nitrure d'indium et de gallium, pour la couche tampon et la couche active (p-InGaN/i-InGaN), et la couche fenêtre contient du n-ZnO. L'optimisation des divers paramètres structurels permet d'améliorer les performances de la cellule solaire, en plus d'absorber autant de rayonnement solaire que possible. Nous avons atteint un rendement de 26,11 %. Cette étude explore le grand potentiel des cellules solaires à base d'InGaN et peut être utilisée pour la conception et la fabrication de cellules solaires à base de nitrures III à haute efficacité.

Les mots-clés : $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$; les cellules solaires ; simulation numérique ; un rendement.

Abstract

$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, as a nitride semiconductor, holds promise for modern optoelectronic devices. It has garnered considerable attention in recent years. However, due to its strong modulation of the energy band gap spanning from UV to the visible spectrum (0.7,3.4 eV) and its intriguing absorption coefficient which can vary from 10^3 to 10^5 cm^{-1} , it can be deemed a potential candidate for high-efficiency solar cells. We conducted device modeling and numerical simulation using the SCAPS-1D software in this study. We optimized the photovoltaic characteristics of a solar cell primarily comprises indium gallium nitride semiconductors, for the buffer layer and the active layer (p-InGaN/i-InGaN), with the window layer containing n-ZnO. Optimizing various structural parameters allow to improving solar cell performance, alongside maximizing solar radiation absorption. We achieved an efficiency of 26.11%. This study explores the significant potential of InGaN-based solar cells and can be utilized for the design and fabrication of high-efficiency III-nitride solar cells.

The keywords: $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$; solar cells; Numerical simulation; an efficiency.

ملخص

$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ هو مركب شبه موصل من نيتريد الغاليوم والإنديوم فعال للأجهزة الكهروضوئية الحديثة. لفت هذا النوع من المواد انتباهها كبيرا في السنوات الأخيرة بسبب تأثيره القوي على فجوة الطاقة من الأشعة فوق البنفسجية إلى الطيف المرئي (0.7 - 3.4 إلكترون فولت) ومعامل امتصاصه الذي يتراوح بين 10^3 إلى 10^5 سم^{-1} ، يمكن اعتباره مرشحا محتملا للخلايا الشمسية ذات الكفاءة العالية. تم في هذا البحث نمذجة الجهاز ومحاكاته بواسطة برنامج SCAPS-1D. تم تحسين الخصائص الضوئية للخلية الشمسية، التي تتكون من شبه الموصلات (نيتريد الإنديوم والغاليوم) في طبقة التخزين والطبقة النشطة (p-InGaN/i-InGaN)، وتحتوي الطبقة النافذة على n-ZnO. يساعد تحسين مختلف المتغيرات الهيكلية على تحسين أداء الخلية الشمسية، بالإضافة إلى إمتصاص أكبر للإشعاع الشمسي. تم تحقيق كفاءة بنسبة 26.11%، تبين هذه الدراسة الإمكانيات الهائلة للخلايا الشمسية القائمة على InGaN حيث يمكن إستخدامها في تصميم وتصنيع خلايا شمسية عالية الكفاءة من النيتريدات III.

الكلمات الرئيسية: $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ؛ الخلايا الشمسية؛ المحاكاة الرقمية؛ كفاءة.