

Université Mohamed Khider de Biskra

Faculté des Sciences et de la Technologie Département de génie électrique

MÉMOIRE DE MASTER

Sciences et Technologies Electronique Système embarquée

Réf.: Entrez la référence du document

Présenté et soutenu par : **Kim Salah**

Le : dimanche 24 juin 2018

Effet de la fraction molaire sur la cellule solaire en InGaN.

Jury:

M. TerghiniWarda
 MAA Université Biskra
 Président
 Dr. Boukerdine Salah Eddine
 MAA Université Biskra
 Examinateur
 Pr. Tobbeche Souad
 Pr Université Biskra
 Rapporteur

Année universitaire: 2017 - 2018

Résumé

L'objectif de notre travail est la simulation une cellule solaire p(GaN)-i(InGaN)-n(GaN) par le logiciel Atlas-Silvaco et l'étude de l'influence des paramètres tels que la fraction molaire x, l'épaisseur de la couche intrinsèque et l'effet de la température sur ses paramètres photovoltaïques. Ce travail permet de concevoir de cellules solaires en InGaN/GaN de bonnes performances.

Mots clés: Modélisation, Nitrure d'Indium Gallium, cellules solaires, simulation numérique, Atlas/Silvaco.

ملخص

الهدف من عملنا هو محاكاة خلية شمسية (GaN) -i (InGaN) -n (GaN) ودراسة برنامج Atlas-Silvaco ودراسة تأثير المعلمات مثل الجزء المولي 1 ،x سمك الطبقة الداخلية وتأثير درجة الحرارة على معلماتها الضوئية. هذا العمل يجعل من الممكن تصميم الخلايا الشمسية InGaN / GaN مع الأداء الجيد.

الكلمات المفتاحية النمذجة نترات الانديوم والغاليوم الخلايا الشمسية المحاكاة الرقمية أطلس/سيلفاكو.

Dédicace

Se dédie ce modeste travail à :

Mes chers parents.

Mes frères et mes sœurs.

Toute ma famille.

Cous mes amis.

Tous mes collègues.

Tous ceux qui m'ont aidé pour accomplir ce mémoire.

Tous les professeurs qui nous ont enseigné car si nous sommes là aujourd'hui c'est bien grâce à vous tous, donc un grand merci pour vous.

Xim Salah

Remerciements

Je remercie ALLAH le tout puissant de m'avoir donné le courage, la volonté, la santé et la patience de mener à terme ce présent travail.

Je tiens spécialement à remercier Pr. Tobbeche Souad d'avoir accepté mon encadrement, de son intérêt constant qui m'a guidé dans mon travail, et de ses conseils au cours de mon travail.

J'adresse mes vives reconnaissances à tous les enseignants et le personnel du département de Génie-Electrique filière électronique et spécialement les enseignants de la spécialité système embarqué, sans oublier les étudiants de master électronique et électrotechnique.

Enfin, nous remerciements les membres de jury qui m'ont fait l'honneur d'accepter de juger ce modeste travail.

Kim Salah

List de figures :

Les figures	Titre	Page				
	CHAPITE I					
Figure 1.1	Figure 1.1 Tableau périodique partiel.					
Figure 1.2	Structure wurtzite, exemple du GaN	8				
Figure 1.3	Structure cubique zinc-blende, exemple du GaN.	9				
Figure 1.4	Champ électrique généré par une polarisation spontanée dans un matériau GaN.	9				
Figure 1.5	Couches d'atomes donnant lieu à deux polarités différentes.	10				
Figure 1.6	Diagramme de bande Gan calculé avec la théorie de structure électronique des quasi-particules.					
Figure 1.7	Diagramme de bande InN calculé avec la théorie de structure électronique des quasi-particules.					
Figure 1.8	Variation du gap du GaN en fonction de la température.	12				
Figure 1.9	Variation du gap de l'InN en fonction de la température.	12				
Figure 1.10	Variation du gap d' $In_xGa_{1-x}N$, en fonction de la fraction de mole In.					
Figure 1.11						
Figure 1.12	Variation des masses effectives de l'alliage $In_xGa_{1-x}N$ en fonction de la composition x .					
Figure 1.13	Variation de l'affinité électronique dans $In_xGa_{1-x}N$ avec la composition x	16				
Figure 1.14	Courbes de mobilité des électrons (a) et des trous (b) en fonction de leur concentration.	18 _{III}				

Figure 1.15	Indice de réfraction du GaN.	19		
Figure 1.16	Schéma des chemins optiques.	20		
Figure 1.17	Courbe de transmission (noire) et de réflexion (rouge) du GaN.			
Figure 1.18	Courbe d'absorption du GaN.	21		
Figure 1.19	Recombinaison SRH via un défaut dans le gap. L'énergie libérée durant la recombinaison est dissipée par une vibration du réseau (i.e. par l'émission d'un phonon).	22		
Figure 1.20	Recombinaison radiative dans un semi-conducteur à gap indirect. Dans le cas du gap indirect, la recombinaison nécessite l'émission simultanée d'un photon et d'un phonon afin de conserver la quantité de mouvement.	23		
Figure 1.21	Recombinaison Auger : l'énergie libérée est transmise soit à un électron de la bande de conduction (à droite) soit à un trou de la bande de valence (à gauche).	24		
Figure 1.22	Recombinaisons en surface d'un semi-conducteur via les défauts d'interfaces.	25		
Figure 1.23	Concentration d'électrons (noir) et concentration d'atomes de silicium (blanc) en fonction du flux de silane, SiH4.	26		
Figure 1.24	Mobilité des porteurs de charges à température ambiante en fonction de la concentration d'électrons.	26		
Figure 1.25	Mobilité des trous en fonction de la concentration de trous dans un film de P-GaN fabriqué par épitaxie par jet	27		

	moléculaire assistée plasma à 650°C.			
	CHAPITRE II			
Figure 2.1	Effet PV dans (a) une jonction p-n simple et (b) multijonctions.			
Figure 2.2	Spectre d'émission solaire.	33		
Figure 2.3	Absorption optique des semi-conducteurs à gap direct et indirect.	34		
Figure 2.4	Structure et diagramme de bande d'une cellule Photovoltaïque sous éclairement.	35		
Figure 2.5	Caractéristiques I(V) à l'obscurité et sous éclairement d'une cellule photovoltaïque.	37		
Figure 2.6	Schéma équivalent d'une cellule solaire.	37		
Figure 2.7	Caractéristiques I(V) et P(V) d'une cellule solaire.			
Figure 2.8	Structure d'une cellule solaire PIN à double hétérojonction proposé par Zeng.	43		
Figure 2.9	Caractéristiques J, V et P, V de la cellule à base d'InGaN avec contact semi-transparent.	43		
Figure 2.10	Caractéristiques J, V et P, V de la cellule à base d'InGaN avec une grille.	43		
Figure 2.11	Schéma de la cellule solaire pin en double hétérojonction proposée par Jani et al.	44		
Figure 2.12	Schéma de la cellule solaire pin en double hétérojonction proposée par Neufeld et al.	44		

Figure 2.13	Schéma de la cellule solaire pin à hétérojonction n-	
	In _{0,4} Ga _{0,6} N/p-Si proposée par Tran et al.	
Figure 2.14	Schéma synoptique de la cellule solaire multi-jonctions.	45
Figure 2.15	Rendement (η), densité de courant de court-circuit (J_{cc}), voltage en circuit-ouvert (V_{co}) et facteur de forme (FF) des cellules solaires de InGaN, cercle : simple jonction (SJ), carré : double jonctions (DJ), triangle : triple jonction (TJ).	46
	CHAPITRE III	
Figure 3.1	:L'ensemble d'outils TCAD de Silvaco.	51
Figure 3.2	Organigramme de la structure VWF.	
Figure 3.3	Entrées et sorties d'Atlas.	55
Figure 3.4	L'interface de Deckbuild.	56
Figure 3.5	Exemple de Tonyplot courbe IV.	57
Figure 3.6	Définition du maillage avec Atlas.	59
Figure 3.7	Définition des régions avec Atlas.	
Figure 3.8	Attribution de matériaux pour les régions avec Atlas.	
Figure 3.9	Définition des électrodes avec Atlas.	61
Figure 3.10	Types et niveau de dopage avec Atlas.	62

Figure 3.11	gure 3.11 Exemple de Tonyplot courbe PV.				
	CHAPITRE IV				
Figure 4.1	Structure p-i-n de la cellule solaire en InGaN/GaN simulée dans Atlas-Silvaco.				
Figure 4.2	Caractéristique J(V) et P(V) de la cellule solaire en InGaN/GaN.	73			
Figure 4.3	variation de l'énergie de gap en fonction la fraction molaire x de l'InGaN/GaN.	74			
Figure 4.4	Caractéristiques J(V) en fonction de la fraction molaire x de l'InGaN/GaN.				
Figure 4.5	Les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire en InGaN/GaN en fonction de la fraction molaire de la couche intrinseque obtenus par simulation.	76			
Figure 4.6	Caractéristiques I(V) en fonction de l'épaisseur de l'InGaN/GaN.				
Figure 4.7	Les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire en InGaN/GaN en fonction de l'épaisseur de couche i obtenus par simulation.				
Figure 4.8	Variation de l'énergie du gap du matériau InGaN avec la température pour une fraction molaire x=0.3.				
Figure 4.9	Caractéristiques J(V) en fonction de la Température de l'InGaN.				
Figure 4.10	Les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire en InGaN/GaN en fonction de la température obtenus par simulation.	81			

List de tableaux :

Tableau	Page	
	CHAPITRE I	
Tableau 1.1	Paramètres structuraux pour le GaN et l'InN.	8
Tableau 1.2	les paramètres de l'équation de Varshni[5]	12
Tableau 1.3	Tableau récapitulatif des paramètres optiques des composants GaN et InN [18, 19].	21
	CHAPITRE III	1
Tableau3.1	Groupes de commande d'atlas et déclarations primaires	
	CHAPITRE IV	1
Tableau4.1	Paramètres photovoltaïques de la cellule solaire en InGaN/GaN.	72

Sommaire

Dédicace	I
Remerciement	II
Liste des figures et tableaux	. III
Introduction générale	2
Références de l'introduction générale	5
Chapitre 1	
Propriétés fondamentales du Matériau InGaN	
1.1 Introduction	7
1.2 Définition d'InGaN	7
1.3Propriétés structurales	7
1.4 Propriétés électriques et électroniques	9
1.4.1 Polarisation spontanée et piézoélectrique	9
1.4.1.1 Polarisation spontanée	9
1.4.1.2 Polarisation piézoélectrique	9
1.4.2 Gap d'énergie interdite dans les nitrures	10
1.4.3 Evolution du gap avec la température	11
1.5 Propriétés des alliages ternaires In _x Ga _{1-x} N	13
1.5.1 Le ternaire In _x Ga _{1-x} N	.13
1.5.2 Formules de Vegard et Phillips.	13
1.5.3 Variation du gap d' $In_xGa_{1-x}N$, en fonction de la fraction de mole x (In)	. 13
1.5.4Les paramètres de maille	14
1.5.5 Les masses effectives	15
1.5.6 Affinité électronique	16
1.5.7 La permittivité	16
1.5.8 Mobilité des porteurs dans les nitrures	
1.6 Propriétés optiques	18
1.6.1 Indice de réfraction	18
1.6.2 Gap d'absorption	20
1.7 Mécanisme de recombinaison.	22
1.7.1 Recombinaisons Shockley-Read-Hall	.22
1.7.2 Recombinaisons radiatives	23

Sommaire

1.7.3 Recombinaisons Auger	.24
1.7.4 Recombinaisons en surface.	.24
1.8 Les procédés de	
dopage	.25
1.8.1 Le dopage de type N	.26
1.8.2 Le dopage de type P	.27
1.9 Conclusion	.27
Références du chapitre 1	28
Chapitre 2	
Généralités sur les cellules solaires	
2.1 Introduction	.31
2.2 Effet photovoltaïque	.31
2.3 Spectre solaire	.32
2.4Génération de porteurs en excès par la lumière	33
2.5 Fonctionnement d'une cellule photovoltaïque	34
2.6 Caractéristiques électriques d'une cellule solaire	36
2.7 Circuit équivalent d'une cellule photovoltaïque	.37
2.8 Paramètres d'une cellule solaire	38
2.8.1 Courant de court-circuit, <i>I_{cc}</i>	38
$2.8.2$ Tension de circuit ouvert, V_{co}	38
2.8.3 Facteur de forme, FF	39
2.8.4 Rendement de conversion η	.39
2.9 Réponse spectrale d'une cellule photovoltaïque	40
2.10 Cellules photovoltaïques à base d'InGaN	41
2.10.1 Simples jonctions	42
2.11 Cellule solaire multi-jonctions.	45
2.12 Conclusion	46
Références du chapitre 2.	.47

Sommaire

Chapitre 3

Logiciel TCAD-SILVACO

3.1 Introduction503.2 Tcad-Silvaco50
3.3 Atlas53
3.3.1 Deckbuild
3.3.2 Tonyplot56
3.4 Travailler avec ATLAS. 57
3.5 Spécification de la structure
3.5.1 Mesh
3.5.2 Région
3.5.3 Electrodes
3.5.4 Doping61
3.6 Spécification des paramètres des matériaux et modèles physique
3.7 Sélection de la méthode numérique
3.8 Spécification de Solution
3.9 Analyse des Résultats
3.10 Conclusion
Références du chapitre 3
Chapitre 4
Simulation numérique de la cellule solaire et résultats de simulation
4.1 Introduction
4.2 Structure de la cellule solaire en InGaN dans Atlas.Silvaco
4.3 Modèles et paramètres de simulation
4.4 Résultats de simulation et discussions
4.4.1 Influence de la fraction molaire sur la cellule solaire InGaN/GaN73
4.4.2 Effet de l'épaisseur de la couche intrinsèque sur la cellule solaire InGaN/GaN.76 4.4.3 Effet de la température sur la cellule solaire
4.4.4 Conclusion

Introduction générale

INTRODUCTION GENERALE

L'InGaN apparaît à l'heure actuelle comme le matériau le plus prometteur pour les applications photovoltaïquesavec des possibilités de hauts rendements de conversion. Les matériaux InGaN ont une énergie de gap modulable intéressante variant de 0,7 eV à 3,42 eV et un haut coefficient d'absorption optique de plus de 10⁵/cm qui indique une meilleure absorption du spectre solaire [1.2]. Son énergie de gap peut être modulée en variant le taux d'Indium x dans l'alliageIn_xGa_{1-x}N, c'est un matériau très prometteur pour les cellules solaires à couche ultra-minces dans les applications spatiales. Il est possible de faire croitre plusieurs couches avec des énergies de gap de InGaN différentes, une cellule multi-jonction à deux couches avec des énergies de gap de 1,1 eV et 1,7 eV peut atteindre théoriquement un rendement maximum de 50%. En déposant des multi-couches modulées à un large intervalle de l'énergie de gap, un rendement supérieur à 70% est théoriquement prévu [3].

L'objectif de notre travail est la simulation d'une cellule solaire à base du nitrure d'Indium Gallium InGaN.

- ❖ Le premier chapitre présente les matériaux semi-conducteurs III-V ainsi que les principales propriétés des nitrures de Gallium Indium «InGaN».
- ❖ Le deuxième chapitre présente les caractéristiques d'une cellule solaire et les types du Cellule photovoltaïque à base d'InGaN.
- ❖ le troisième chapitre présente le logiciel de simulation Tcad-Silvaco.
- ❖ Le quatrième chapitre présente les résultats de simulation d'une structure à base de matériau InGaN/GaN.

REFERENCE

- [1] Yamaguchi, M., "III-V compound multi-junction solar cells: present and future," Sol. Energy Mater. Sol. Cells 75, 261-269 (2003).
- [2] Wu, J., Walukiewicz, W., Yu, K. M., Ager III, J. W., Haller, E. E., Lu, H., Schaff, W. J., Saito, Y. and Nanishi, Y., "Unusual properties of the fundamental band gap of InN," Appl. Phys. Lett. 80, 3967-3969 (2002).
- [3] Matsuoka, T., Okamoto, H., Nakao, M., Harima, H., Kurimoto, E., "Optical bandgap energy of wurtize InN," Appl. Phys. Lett. 81, 1246-1248 (2002).
- [4] ATLAS User's Manual, Device Simulation Software, Version 5.20.2.R, SILVACO International, Santa Clara, CA, 2015.

Chapitre 1

1.1 Introduction

La recherche sur les matériaux semiconducteurs a commencé au début du 19 ème siècle. Parmi les plus célèbres, nous trouvons le silicium (Si). La recherche de composants électroniques présentant des propriétés de transport supérieures à celles du Silicium, conduit la plupart des grands laboratoires de recherches à s'intéresser à des nouveaux matériaux et en particulier les composés semiconducteurs (III-V). Parmi ces semiconducteurs (III-V), on trouve principalement le nitrure de gallium-indium (InGaN) qui constitue la cellule solaire à étudier dans ce travail.

1.2 Définition d'InGaN

L'InGaN apparaît à l'heure actuelle comme le matériau le plus prometteur pour les applications photovoltaïques. Il est activement étudié parce qu'il représente une nouvelle catégorie de matériaux possédant des propriétés uniques :

Un large gap d'énergie interdite direct, lui permettant une large couverture spectrale, de fortes liaisons interatomiques ou encore une forte conductivité thermique. Son gap est modulable avec le taux de substitution de l'Indium dans l'alliage. Avant d'étudier le composé ternaire InGaN, il convient d'étudier les propriétés essentielles de ses composés binaires qui sont le nitrure d'indium (InN) et Le nitrure de gallium GaN. Figure 1.1 représente le tableau périodique partiel des éléments chimiques.

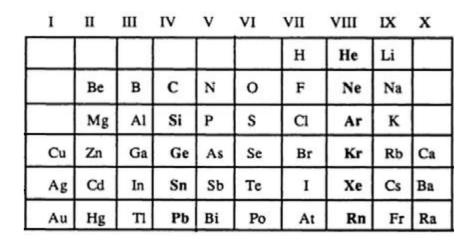


Figure 1.1 : Tableau périodique partiel.

1.3Propriétés structurales

Les nitrures GaN et InN se présentent essentiellement sous deux formes cristallines : la structure hexagonale «wurtzite » et la structure cubique « zinc -blende ».

Dans les conditions ambiantes, la structure des nitrures-III est la wurtzite, une structure hexagonale (figure 1.2). Cette structure est définie par trois paramètres, la largeur d'un côté hexagonale $\bf a$, la hauteur de la maille élémentaire $\bf c$, et le paramètre interne $\bf u$ décrivant la séparation dessous-réseaux des anions (N^{-3}) et des cations (Ga^{+3}) selon l'axe c^3 . Ce dernier est défini comme étant la longueur de la liaison cation-anion divisée par $\bf c$. Il est égal à 0,375 pour un cristal wurtzite idéal.

La deuxième structure zinc-blende représentée par la figure 1.3 est constituée de deux sous réseaux cubiques à faces centrées, l'un est constitué d'un élément III et l'autre d'un élément V, les deux sous réseaux étant décalés du quart de la diagonale principale soit \boldsymbol{a} , « \boldsymbol{a} » étant la longueur du cube, Le tableau (1.1) présente les paramètres de maille des nitrures GaN et l'InN pour les deux structures.

Cette structure ne peut quant à elle être obtenue que dans des conditions de croissance bien particulières, elle est thermodynamiquement instable. Dans les nitrures les liaisons sont de type covalent présentant de propriétés partiellement ioniques, telle que l'une des quatre liaisons reçoit deux électrons de l'élément V.

Wurtzite Cubique $a(A^0)$ $c(A^0)$ U $a(A^0)$ 3.189 5.185 4.47 GaN 0.377 5.70 InN 3.54 0.378 4.96

Tableau 1.1: Paramètres structuraux pour le GaN et l'InN.

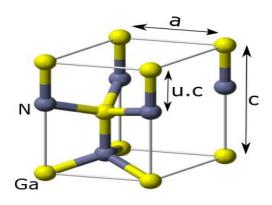


Figure 1.2 : Structure wurtzite, exemple du GaN

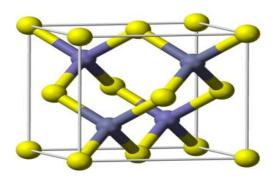


Figure 1.3: Structure cubique zinc-blende, exemple du GaN.

1.4 Propriétés électriques et électroniques

Les propriétés électriques d'un matériau proviennent de son gap d'énergie interdite **Eg**, et de sa densité de porteurs.

1.4.1 Polarisation spontanée et piézoélectrique

1.4.1.1 Polarisation spontanée

Sans être soumis à aucune contrainte externe, une couche de nitrure de gallium peut cependant présenter une polarisation macroscopique non nulle. Ce champ électrique existe parce que le cristal présente une asymétrie entre les barycentres des charges d'électrons avec celles des trous. On dit que le cristal manque de symétrie d'inversion. On note aussi qu'un lien entre les deux atomes qui n'est pas purement covalent est un facteur qui peut causer la création de ce champ électrique. En d'autres termes, le matériau GaN se définit comme étant un matériau naturellement polarisé grâce aux charges présentes sur chacune de ses faces, qui sont identiques mais de signes opposés comme illustré dans la figure (1.4) [1].

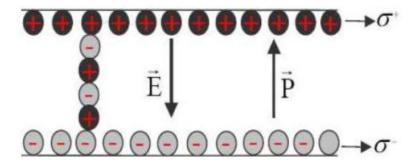


Figure 1.4 : Champ électrique généré par une polarisation spontanée dans un matériau GaN.

1.4.1.2 Polarisation piézoélectrique

L'origine de la polarisation piézoélectrique est la structure cristalline du nitrure de gallium. Les deux structures du GaN, hexagonale et cubique, sont non centro-symétriques.Ce désaccord de maille entre la couche d'AlGaN ou InGaN et la couche de GaN par exemple, induit une sorte de contrainte mécanique, formant une charge de polarisation d'interface, et créant ainsi ce qu'on appelle le champ piézoélectrique. C'est la polarité du cristal qui définit le signe de cette charge. Pour une polarité Nitrure le champ sera pointé du substrat vers la surface, et l'inverse sera pour une polarité Gallium (figure 1.5).

Grâce à ce champ piézoélectrique, les dispositifs AlGaN/GaN sont conçus pour utilisation en hautes puissances [2].

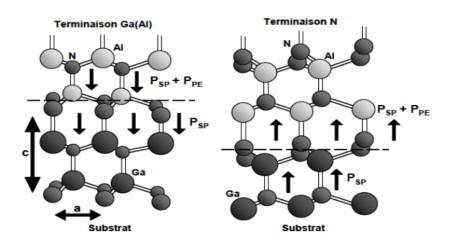


Figure 1.5 : Couches d'atomes donnant lieu à deux polarités différentes.

1.4.2 Gap d'énergie interdite dans les nitrures

Le gap d'énergie interdite des nitrures est la caractéristique la plus intéressante dans cettefamille de semi-conducteur, d'ailleurs c'est la principale raison pour laquelle les recherchessont focalisées là-dessus. Leur gap d'énergie interdite direct les rends uniques dans leursgenres en leurs permettant de couvrir la majorité du spectre solaire, en allant du procheultraviolet à l'infrarouge, ce qui est vraiment prometteur pour des applicationsphotovoltaïques ou bien de LEDs grâce à la quasi-conversion ou l'émission de lumière.

Le GaN a un gap direct de 3.3 eV à la température de 300K et pour l'InN un gap direct de 0.79 eV à unetempérature de 300K. Les diagrammes de bande théorique pourGaN et InN sont illustrés dans les deux figures (1.6) et (1.7) respectivement.

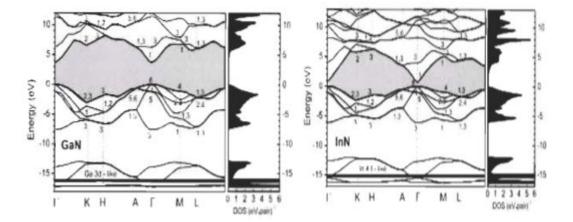


Figure 1.6 : Diagramme de bande GaN calculé avec la théorie de structure électronique des quasi-particules[3]

Figure 1.7 : Diagramme de bande InN calculé avec la théorie de structure électronique des quasi-particules[3]

Où les densités d'états du GaN et InN sont représentés par les parties droites et les bandes d'énergies interdites par les parties grises. Les nombres représentent les points de hautesymétrie en utilisant la notation de Rashba avec les maximums des bandes de valences prisent comme la référence des énergies [3].

1.4.3 Evolution du gap avec la température

L'énergie de bande interdite varie avec la température : on observe expérimentalementune diminution de cette énergie lorsque la température augmente. Ceci est dû à deuxphénomènes : la dilatation thermique qui modifie les distances interatomiques du réseaucristallin et deuxièmement l'interaction électron-phonon ; cette deuxième étant l'élémentprépondérant dans la modification de l'énergie de bande interdite.

Pour évaluer cette modification d'énergie on utilise la formule empirique (dite de Varshni)permettant d'évaluer la variation de l'énergie de bande interdite en fonction de latempérature [4].

$$E_g(T) = E_g(T = 0) - \frac{\alpha T^2}{\beta - T}$$
 (1.1)

 $E_g(T)$ le gap du matériau à une température donnée [eV],

 $E_g(0)$ le gap du matériau à 0°K [eV],

A est une constante empirique $[eV/K^{-1}]$,

B une constante associée à la température de Debye [K],

T la température en [K].

Ces paramètres pour le GaN et l'InN sont rassemblés dans le Tableau (1.2)

Tableau 1.2 : les paramètres de l'équation de Varshni[5]

	$E_g(0\mathrm{K})[\mathrm{eV}]$	α [meV/K]	β[K]	$\Delta E(300-0K) \text{ [eV]}$
GaN	3.507	0.909	830	72.10 ⁻³
InN	0.69	0.41	454	49,9.10 ⁻³

En utilisant cette équation (1.1) on obtient les graphes suivants :

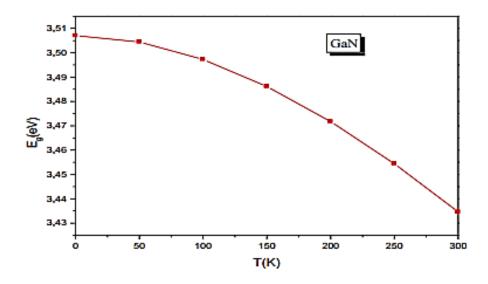


Figure 1.8: Variation du gap du GaN en fonction de la température.

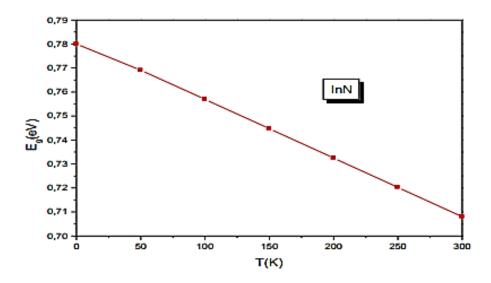


Figure 1.9: Variation du gap de l'InN en fonction de la température.

1.5 Propriétés des alliages ternaires In_xGa_{1-x}N

1.5.1 Le ternaire In_xGa_{1-x}N

L'alliage ternaire In_xGa_{1-x}N est composé de deux binaires GaN et InN. Ce matériau possède un gap direct qui varie entre 0,72 eV et 3,42 eV. Il balaye le spectre visible entier du proche infrarouge à l'ultraviolet. Il a une haute capacité thermique et sa sensibilité à des rayonnements ionisants est faible.

1.5.2 Formules de Vegard et Phillips

Certaines propriétés (Y) comme le paramètre de maille, la polarisation et les constantes piézoélectriques peuvent être déduites par interpolation linéaire suivant la loi de Vegard :

$$Y(In_{1-x}Ga_xN) = (1-x)Y(In) + x.Y(GaN)$$
(1.2)

Avec une erreur inférieure à 2% pour n'importe quelle valeur de x ($0 \le x \le 1$).

1.5.3 Variation du gap d' $In_xGa_{1-x}N$, en fonction de la fraction de mole x (In)

Pour l'énergie de bande interdite, l'équation (1.2) ne convient pas, il faut utiliser la relation quadratique (1.3) de J.C. Phillips.

$$E_g^{\ln_x Ga_{1-x}N} = x.E_g^{\ln N} + (1-x).E_g^{GaN} - x.(1-x).b$$
(1.3)

Où b est le paramètre de courbure (bowing paramètre).

En remplaçant $E_g(InN)$ et $E_g(GaN)$ par leurs valeurs à 300K, et en prenant b=1, nous trouvons les équations qui donnent le gap d' $In_xGa_{1-x}N$ en fonction de x [6].

$$\{Eg_1(x) = x^2 - 2.41x + 3.3 \text{ eV}$$
 (cubique) (1.4)

$$\{Eg_2(x) = x^2 - 2.43x + 3.34 \,\text{eV} \quad \text{(hexagonal)}$$
 (1.5)

L'énergie du gap diminue quand la composition d'indium augmente (figure 1.10).

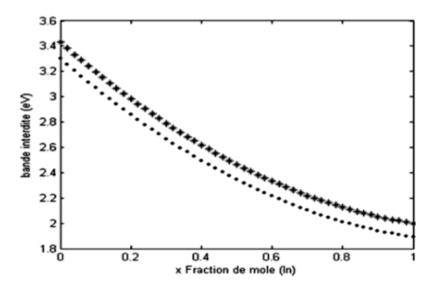


Figure 1.10: Variation du gap d' $In_xGa_{1-x}N$, en fonction de la fraction de mole In [7].

1.5.4 Les paramètres de maille

Les paramètres de maille a et c sont donnés par la Loi de Vegard [8] :

$$a(In_x Ga_{1-x}N) = a(GaN) \cdot (1-x) + a(InN) \cdot x \tag{1.6}$$

$$a(In_x Ga_{1-x}N) = 3.189 \cdot (1-x) + 3.54 \cdot x \tag{1.7}$$

$$c(In_{x}Ga_{1-x}N) = c(GaN) \cdot (1-x) + c(InN) \cdot x \tag{1.8}$$

$$c(In_x Ga_{1-x}) = 5.184 \cdot (1-x) + 5.703 \cdot x \tag{1.9}$$

Les variations linéaires des paramètres de maille a et c en fonction de la composition x sont représentées dans la figure 1.11.

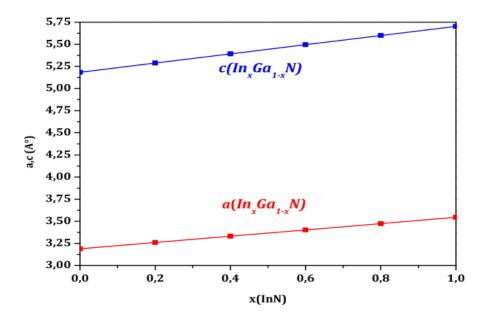


Figure 1.11: Variation du paramètre de maille d' $In_xGa_{1-x}N$ en fonction de la composition x de l'alliage.

Cette variation est linéaire et croissante avec la composition x en Indium. A x=0, le paramètre de maille prend la valeur du GaN (a=3.189 A°, c=5.184 A°) et il augmente pour atteindre les paramètres de maille de l'InN (a=3.545 A°, c=5.703 A°) à x=1.

1.5.5 Les masses effectives

Les masses effectives des électrons et des trous sont données par les équations suivantes [9]:

$$m^*(In_x Ga_{1-x}N) = x \cdot m^*(InN) + (1-x) \cdot m^*(GaN)$$
(1.10)

$$m_{e}^{*}(In_{x}Ga_{1-x}N) = 0.11x + 0.20(1-x)$$
 (1.11)

$$m_h^*(In_xGa_{1-x}N) = 0.17x + 1.0(1-x)$$
 (1.12)

Les allures de ces équations sont représentées dans la figure 1.12.

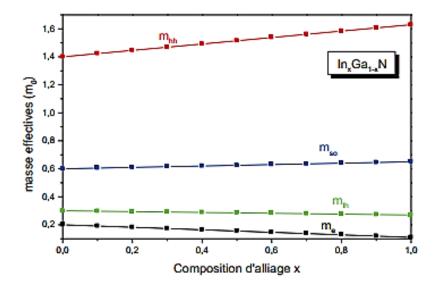


Figure 1.12 : Variation des masses effectives de l'alliage $In_xGa_{1-x}N$ en fonction de la composition x.

1.5.6 Affinité électronique

L'affinité électronique dans InGaN est donnée par l'équation suivante [10] et représentée dans la figure 1.13.

$$eX_{In_xGa_{1-x}N} = 3.8(1-x) + 4.7x \tag{1.15}$$

D'après cette figure, on remarque que l'affinité dans InGaN augmente avec la composition x de l'indium.

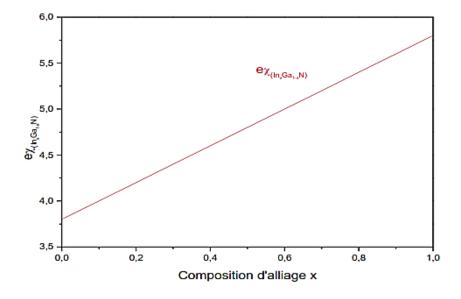


Figure 1.13: Variation de l'affinité électronique dans $In_xGa_{1-x}N$ avec la composition x.

1.5.7 La permittivité

La permittivité électronique dans InGaN est donnée par l'équation suivante [11] :

$$\varepsilon(In_{x}Ga_{1-x}N) = 15.3x + 8.9(1-x) \tag{1.16}$$

1.5.7 Mobilité des porteurs dans les nitrures

La mobilité est une caractéristique très importante du matériau, car elle traduit la capacité qu'ont les porteurs à se déplacer dans le matériau. C'est donc un facteur déterminant pour les dispositifs. Ceci est très important pour des domaines comme l'optoélectronique, ou les télécommunications. D'après la définition de la mobilité, le transport électronique dépend essentiellement de deux paramètres : la masse effective des électrons et la fréquence des interactions avec le réseau cristallin. Or, toute modification dans ce réseau, comme l'élévation de la température ou le dopage, va modifier la mobilité des porteurs notée généralement μ . Ces dépendances de la mobilité sont calculables à l'aide de la formule suivante [12] :

$$\mu = \mu \min(\frac{T}{300})^{\beta} + \frac{\mu \max(\frac{T}{300})^{\alpha} - \mu \min(\frac{T}{300})^{\beta}}{1 + (\frac{Ntot}{Nref})^{\gamma}}$$
(1.17)

Où T est la température, N la concentration des porteurs, α , β et γ des paramètres propres à chaque semi-conducteur. L'équation précédente nous permet de tracer l'évolution des mobilités en fonction de la concentration de porteurs pour des températures variant de 250K à 475K. Ces courbes sont représentées sur la figure 1.14.

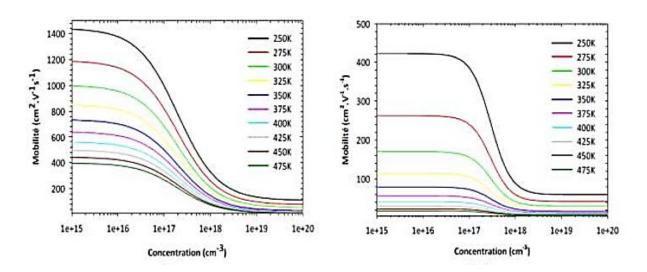


Figure 1.14 : Courbes de mobilité des électrons (a) et des trous (b) en fonction de leur concentration.

On constate donc que plus le dopage du matériau est élevé, plus la mobilité va chuter, ce qui est le cas de tous les semi-conducteurs. On constate également que l'impact de la température sur la mobilité des porteurs est important à faible concentration.

1.6 Propriétés optiques

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

1.6.1 Indice de réfraction

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

L'indice de réfraction est aussi un facteur de grande influence pour les applications photovoltaïques, car il nous permet d'augmenter l'efficacité d'absorption d'une cellule solaire et obtenir un meilleur rendement par conséquent. Ce dernier est défini par le rapport [13, 14] :

$$n = \frac{c}{v} \tag{1.18}$$

Avec:

c : la vitesse de la lumière dans le vide.

v : la vitesse de la lumière dans le matériau.

L'indice de réfraction des nitrures GaN et InN est estimé approximativement à 2.3 et 2.9 respectivement dans l'infrarouge [13, 14].

La vitesse de la lumière dans le matériau dépend généralement de la longueur d'onde.

Un exemple de GaN, réalisé par Barker et llegems pour des longueurs d'onde allant de 0. 35 à 10 µm, est illustré dans la figure (4.7) [15].



Figure 1.15: Indice de réfraction du GaN[15].

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

Les chercheurs ont aussi démontré une relation entre l'indice de réfraction et l'énergie d'un photon absorbé par le matériau sous l'expression [16] :

$$E_g = \frac{hv}{\lambda} \tag{1.19}$$

En se basant sur cette relation, les chercheurs ont conclu que l'indice de réfraction se caractérise lui aussi par un paramètre de courbure comme le gap d'énergie interdite [16]. L'indice de réfraction est aussi important pour le calcul des coefficients d'absorption selon la loi de Snell-Descartes [16]:

$$n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2 \tag{1.20}$$

Où:

 n_1 et n_2 sont les indices de réfraction des milieu x.

 θ_1 et θ_2 sont les angles des rayons lumineux.

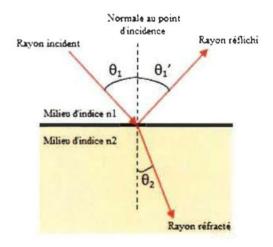


Figure 1.16: Schéma des chemins optiques[16].

1.6.2 Gap d'absorption

Le coefficient d'absorption a aussi une grande importance spécialement pour les cellules solaires, car ce dernier est responsable de la quantité de photons absorbés et par conséquent la quantité de porteurs produits. En d'autre terme, c'est la quantité de lumière absorbée [17].

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

$$II_{t}(\lambda) = I_{i}(\lambda) * \exp \alpha(\lambda) d_{t}(\lambda) = I_{i}(\lambda) * \exp \alpha(\lambda) d$$
(1.21)

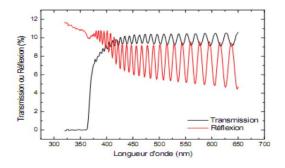
$$\alpha(\lambda) = \frac{4\pi k(\lambda)}{\lambda} \tag{1.22}$$

Où:

 I_i : Intensité incidente.

*I*_t: Intensité transmise.

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



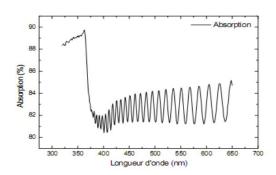


Figure 1.17 : Courbe de transmission (noire) et de réflexion (rouge) du GaN[18].

Figure 1.18 : Courbe d'absorption du GaN[19].

Les figures (1.16) et (1.17) représentent les courbes de transmission, de réflexion et d'absorption trouvées expérimentalement pour un composant GaN de 350 nm.

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

$$\alpha(E) = \alpha_0 \frac{\sqrt{E - E_g}}{E} \tag{1.23}$$

Avec:

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

 α_0 : Paramètre d'ajustement (eV^{1/2}/cm⁻¹)

Par ailleurs, plusieurs auteurs ont déterminé un coefficient d'absorption pour le GaN et leInN egal a 10^5 cm⁻¹ et 5×10^4 cm⁻¹ respectivement [18,19].

Tableau 1.3 : Tableau récapitulatif des paramètres optiques des composants GaN et InN [18, 19].

Matériau	Indice de réfraction (s.d)	Constantes diélectriques statiques (s.d)	Constantes diélectriques à haute fréquence (s.d)	Coefficient d'absorption (cm ⁻¹)
GaN	2.3	10.4	5.8	105
		9.5	5.35	
InN	2.9	14.4	8.4	5.104
		13.4		

D'après les études menées sur ces éléments nitrures-III, l'alliage InGaN est un très bon absorbant de lumières grâce à ces propriétés optiques. D'ailleurs, il est un meilleur choix que le silicium ou tout autre matériau semi-conducteur pour la réalisation d'une à couche mince, car il suffit de 100 nm de cet alliage pour absorber la totalité d'un spectre, ayant une longueur d'onde de 500 nm contrairement au silicium cristallin qui aura besoin de 1000 nm pour absorber environ 90 % de ce spectre [17].

1.7 Mécanisme de recombinaison

Dans un semi-conducteur, il est possible d'exciter des électrons de la bande de valence vers la bande de conduction, on dit alors que l'on injecte des porteurs en excès Δn ou Δp par rapport à la concentration d'équilibre n_0 ou p_0 . Certains mécanismes interviennent alors pour ramener le cristal àson état d'équilibre : il s'agit des mécanismes de recombinaison. Ces mécanismes peuvent avoir lieu dans le volume ou en surface et sont décrits par le taux de recombinaison U, exprimé en cm^{-3} . s^{-1} en volume et en cm^{-2} . s^{-1} en surface.

1.7.1 Recombinaisons Shockley-Read-Hall

Ce premier mécanisme est le mode de recombinaison dominant dans le silicium, il a été décrit pour la première fois par Shockley et Read en 1952 [20]. Dans ce modèle, la recombinaison ne se fait pas par transition directe d'un électron de la bande de conduction vers la bande de valence mais par l'intermédiaire d'un centre de recombinaison dont le niveau d'énergie est situé dans la bande interdite. Nous le décrirons ici avec un seul centre de recombinaison monovalent c'est-à-dire un défaut ne pouvant avoir que deux états de charge (fig. 1.18).

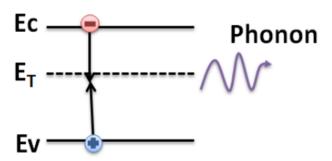


Figure 1.19: Recombinaison SRH via un défaut dans le gap. L'énergie libérée durant la recombinaison est dissipée par une vibration du réseau (i.e. par l'émission d'un phonon).

On écrit alors le taux de recombinaison U_{SRH} .

$$R_{SRH} = \frac{P_n - n_{ie}^2}{\tau_p \left[n + n_{ie} \exp\left(\frac{E_{rap}}{KT_L}\right) + \tau_n \left(p + n_{ie} \exp\left(\frac{-E_{rap}}{KT_L}\right)_e\right) \right]}$$
(1.24)

Avec:

n et p les concentration d'électrons et de trous, respectivement [cm⁻³].

 n_{ie} la concentration intrinsèque d'électrons [cm⁻³].

 τ_n et τ_p les temps de vie des électrons et des trous, dépendant de la densité de défauts [s].

 E_{trap} la différence d'énergie entre la position énergétique du défaut et le niveau de Fermi intrinsèque [eV].

K la constante de Boltzmann [eV.K⁻¹].

 T_L la température [K].

1.7.2 Recombinaisons radiatives

La recombinaison des porteurs en excès peut également se faire directement bande à bande. Dans un matériau à gap direct ce type de transition est très probable et l'énergie résultant de la recombinaison est évacuée en totalité par l'émission d'un photon de fréquence v telle que hv $\sim Ec-Ev$ (la différence d'énergie entre la bande de conduction BC et de valence BV(figure 1.19). Dans un matériau à gap indirect, cela nécessite l'émission de phonons afin de conserver la quantité de mouvement. C'est le mécanisme inverse de l'absorption.

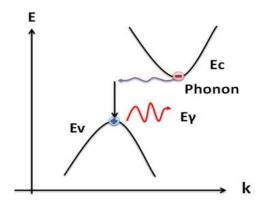


Figure 1.20 : Recombinaison radiative dans un semi-conducteur à gap indirect. Dans le cas du gap indirect, la recombinaison nécessite l'émission simultanée d'un photon et d'un phonon afin de conserver la quantité de mouvement.

Il est décrit par la relation suivante :

$$U_{rad} = \beta.(n.p - n_i^2)$$
 (1.25)

Avec β le coefficient de recombinaison radiative.

1.7.3 Recombinaisons Auger

Le dernier mécanisme de recombinaison est le mécanisme Auger. Les porteurs se recombinent bande à bande, mais contrairement à la désexcitation radiative, l'énergie libérée est transmise à un troisième porteur qui se retrouve excité dans un niveau supérieur de la bande de conduction dans le cas d'un électron ou un niveau plus profond de la bande de valence dans le cas d'un trou. Le troisième porteur se thermalise alors en émettant un ou plusieurs phonons.

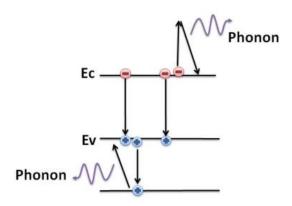


Figure 1.21 : Recombinaison Auger : l'énergie libérée est transmise soit à un électron de la bande de conduction (à droite) soit à un trou de la bande de valence (à gauche).

Du fait de l'interaction à trois particules, c'est un mécanisme qui va dominer lorsque la concentration de porteurs va être importante (fort dopage ou forte injection). Il est décrit par l'équation :

$$U_{Auger} = C_p.p.(n - n_i^2) + C_n.n.(n.p - n_i^2)$$
(1.26)

 C_p et C_n les coefficients Auger pour les électrons et les trous.

1.7.4 Recombinaisons en surface

Par analogie avec les recombinaisons *SRH* en volume, on peut décrire des recombinaisons de surface. On considère alors la surface comme un défaut bidimensionnel du cristal (ou une

rupture de périodicité du cristal causant l'apparition de liaisons pendantes et/ou l'adsorption d'impuretés sur la surface).

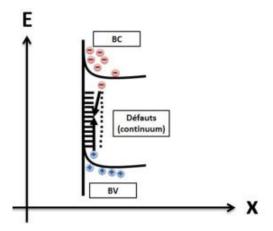


Figure 1.22 : Recombinaisons en surface d'un semi-conducteur via les défauts d'interfaces.

La recombinaison de surface est souvent décrite via le mécanisme SRH en choisissant d'intégrer le continuum de défauts (distribution des défauts) à la surface (D_{it}) et les sections de capture efficace $\sigma_n(E)$ et $\sigma_p(E)$ en fonction de l'énergie. On peut définir le taux de recombinaison en surface $U_{SRH}^{surface}$ en utilisant le même formalisme que pour le volume, mais en considérant les concentrations de porteurs en surface. On obtient alors :

$$S = \frac{U_{SRH}^{surface}}{\Delta n} = \frac{S_{p0}.S_{n0}.(n_0^{surface} + p_0^{surface} + \Delta n^{surface})}{S_{p0}.(n^{surface} + n_1^{surface}) + S_{p0}.(p^{surface} + p_1^{surface})}$$
(1.27)

Avec S la vitesse de recombinaison en surface, $Sp_0 = \sigma_p.v_{th}.N_T$ et $Sn_0 = \sigma_n.v_{th}.N_T$ ayant la dimension de vitesses de recombinaison en surface (cm/s) et $N_T^{surface}$ la densité de défauts surfaciques (en cm⁻²).

1.8 Les procédés de dopage

Le dopage a pour but d'augmenter la quantité d'électrons ou bien de trous dans un matériau en introduisant dans ce dernier des atomes d'une autre nature qui vont se substituer aux atomes originaux, ainsi introduire les porteurs libres. Le rôle du dopage consiste à modifier les caractéristiques du matériau comme par exemple contrôler la conductivité électrique du matériau à travers la création d'une jonction.

1.8.1 Le dopage de type N

Les nitrures sont intrinsèquement de type N, avec un excès d'électrons. L'augmentation du caractère N des nitrures est donc relativement facile. On utilise le plus couramment le silicium, Si, comme dopant de type N. Le silicium occupe le site d'un cation (Ga ou In) et un donneur simple.

Sa concentration dans les couches de nitrure est typiquement de l'ordre de 10^{18} cm⁻³, comme le montre la Figure (1.22). La résistivité des couches a été mesurée entre $1\text{-}10^{\text{-}2}\Omega$ dans le GaN[21]. La Figure (1.23) présente la mobilité des porteurs en fonction de la concentration d'électrons à température ambiante dans le GaN. Cette mobilité diminue avec l'augmentation de la concentration d'électrons et donc du dopage, à cause du phénomène de dispersion des porteurs par les atomes de Si ionisés qui augmente avec la concentration de dopants.

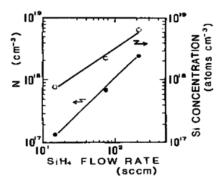


Figure 1.23 : Concentration d'électrons (noir) et concentration d'atomes de silicium (blanc) en fonction du flux de silane, SiH4.

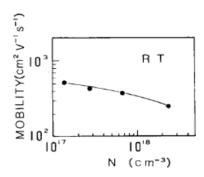


Figure1.24: Mobilité des porteurs de charges à température ambiante en fonction de la concentration d'électrons.

Pour de forts dopages, on observe un effet de saturation de la concentration d'électrons avec l'augmentation de la concentration de dopants. Cet effet s'explique par l'apparition de lacunes de gallium triplement ionisées, compensant le dopage N [22].

D'autres dopants ont également été étudiés comme l'oxygène, l'hydrogène ou le germanium. Cependant, ils restent moins efficaces que le Si parce qu'ils créent une plus grande densité de défauts qui compense d'autant plus le dopage.

1.8.2 Le dopage de type P

Puisque les nitrures sont intrinsèquement de type N, il est difficile d'obtenir un dopage P [23]. En effet, il faut dans un premier temps compenser les électrons en excès présents dans le matériau, avant de créer un excès de trous. Le problème majoritairement rencontré est la création de défauts de compensation lors du dopage, c'est-à-dire que pour un dopant de type P introduit dans le réseau, un défaut possédant un caractère N se créé à proximité annulant l'effet du premier. Ce phénomène est dû à l'énergie de stabilisation du niveau de Fermi proche de la bande de conduction dans GaN et à l'intérieur de la bande de conduction dans InN.

Aujourd'hui, le magnésium (Mg) est le dopant le plus fréquemment utilisé pour les nitrures [23]. Il semble exister une fenêtre de concentration de magnésium, entre ~10¹⁸ et 3×10¹⁹ cm⁻³, dans laquelle le caractère P est présent dans le matériau. Hors de cette fenêtre, l'incorporation de magnésium ne compense que partiellement les électrons intrinsèques de l'InN. La mobilité des trous a été estimée entre 17 et 36 cm²/V.s

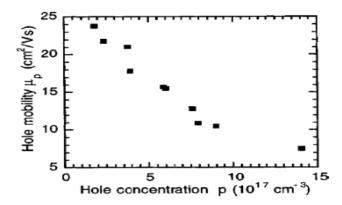


Figure 1.25 : Mobilité des trous en fonction de la concentration de trous dans un film de P-GaN fabriqué par épitaxie par jet moléculaire assistée plasma à 650°C.

1.9 Conclusion

Nous avons vu dans ce chapitre les caractéristiques et les propriétés de l'InGaN tant sur le plan structurel, qu'électrique et optique.

Références

- [1] Hind, Bousbia. 2006. « Analyse et développement de la caractérisation en puissance, rendement et linéarité de transistors de puissance en mode impulsionnel ». Thèse de doctorat en génie électrique, Université de Limoges, 190 p.
- [2] J.J. Harris, K.J. Lee, J.B. Webb, H. Tang, I. Harisson, AL. 2000. « The implications of spontaneous polarization effects for carrier transport measurements in GaN », Semiconductor Science and Technology, Vol. 15, pp. 413-417
- [3] L. C. de Carvalho, A. Schleife, and F. Bechstedt, "Influence of exchange and correlation on structural and electronic properties of AIN, GaN, and InN polytypes," Physical Review B, vol. 84, p. 195105, 2011.
- [4] Y.P. Varshni, Physica34, 149 (1967).
- [5] Wu, J., et al. Temperature dependence of the fundamental band gap of InN. Journal of Applied Physics. 2003, Vol. 94, 4457
- [6] Hamdoune AEK, Elaboration du nitrure de gallium ; Etude de ses propriétés et Applications". Obtenu à l'université de Tlemcen, 21 Juin 2006.
- [7] Hamdoune AEK, Elaboration du nitrure de gallium ; Etude de ses propriétés et Applications". Obtenu à l'université de Tlemcen, 21 Juin 2006.
- [8] L. Vergard. Die konstitution der mischkristalleund die raumfüllung der atome. Zeitschriftfür Physik, 17-26.
- [9] ATLAS User's Manual, Device Simulation Software, Version 5.20.2.R, SILVACO International, Santa Clara, CA, 2015.
- [10] X. Zhang, X.Wang, H. Xiao et al., "Simulation of In 0.65 Ga 0.35 N single-junction solar cell," Journal of PhysicsD: Applied Physics, vol. 40, no. 23, pp. 7335–7338, 2007.
- [11] ATLAS User's Manual, Device Simulation Software, Version 5.20.2.R, SILVACO International, Santa Clara, CA, 2015.
- [12] D.Caughey and R. Thomas: « Carrier mobilities in silicon empirically related to doping and field » IEEE Proceedings, vol. 55, no. 12, pp. 2192-2193, 1967.
- [13] GaN-Gallium nitride. Electronic archive. New Semiconductor Materials. Characteristics and Properties. IoffePhysyco-Technical Institue. [Online].
- [14] InN Indium N itride. New Semiconductor Materials . Characteristics and properties. Ioffe Physico-Technical Institute.
- [15]: http://refractiveindex.infol?group=CRYSTALS & material=GaN

- [16] M.Anani, H. Abid, Z. Cham a, C. Mathieu, A. Sayede, and B. Khelifa, "ln_xGa_{1-x}N refractive index calculations," Microelectronics Journal, vol. 38, pp. 262-266, 2007
- [17] Y. E. Gmili, "Étude et caractérisations par cathodoluminescence de couches minces d'InGaN pour le photovoltaïque," Université de Lorraine, 2013.
- [18] 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 Lett ers, vol. 70, pp. 1089-1091,1997.
- [19] 1. Trainor and K. Rose, "Sorne properties of InN films prepared by reactive evaporation," Journal of Electronic Mat erials, vol. 3, pp. 821-828, 1974.
- [20] W. Shockley and W. T. Read, "Statistics of the Recombinations of Holes and Electrons," Phys. Rev., vol. 87, no. 5, pp. 835–842, 1952
- [21] Koide, N. et al. Doping of GaN with Si and properties of blue m/i/n/n+ GaN LED with Si-doped n+layer by MOVPE. Journal of Crystal Growth. 1991, Vol. 115, 639.
- [22] walukiewicz, W. Intrinsic limitations to the doping of wide-gap semiconductors. Physica B. 2011, Vols. 302-303, 123-134.
- [23] Janotti, A. and Van de Walle, C.G. Applied Physics Letters. 2008, Vol. 92, 032104.

Chapitre 2

2.1 Introduction

Dans les années 70, les couches minces du Si et une gamme entière de nouveaux matériaux de semi-conducteurs (CIS, CdTe, InP, Zn₃P₂, Cu₂Se, WSe₂, GaAs, ZnSiAs) ont été développés. Ils sont presque toutes les matières alternatives employées aujourd'hui pour les panneaux solaires, ainsi le silicium poly-cristallin et amorphe.

Dans ce chapitre, nous débuterons par donner les caractéristiques du rayonnement solaire et la description de la conversion photovoltaïque tout en étudiant les phénomènes physiques ayant lieu telle la génération des photoporteurs. Ensuite, nous décrivons le principe de fonctionnement et les caractéristiques des cellules solaires en général et la cellule solaire en InGaN en particulier.

2.2 Effet photovoltaïque

L'effet photovoltaïque (ou photoélectrique) a été découvert pour la première fois en 1839 par Becquerel en observant le passage du courant électrique entre deux électrodes quand on les expose à la lumière. Le passage d'un courant n'était qu'à partir d'un seuil de fréquence indépendamment de l'intensité de la lumière. Ce phénomène n'a été compris qu'en 1905 quand Einstein et Planck ont présenté le principe du photon. L'effet PV est la transformation de l'énergie de la lumière en énergie électrique.

Pour les semi-conducteurs, quand un photon arrive sur un matériau, deux possibilités s'imposent : s'il a une énergie plus faible que l'énergie de gap (E_g) , dans ce cas le matériau est transparent pour ce photon, mais s'il a une énergie équivalente ou supérieure à E_g , il sera absorbé et une paire électron-trou sera créé. Si l'on arrive à séparer cette paire électron-trou et collecter les porteurs avant qu'ils ne se recombinent, on obtient un courant électrique. En général, la séparation d'une paire électron-trou est faite grâce à une jonction p-n qui crée un champ électrique séparant les porteurs libres. La Figure 2.1(a) montre une image expliquant l'effet PV dans les semiconducteurs. Les photons ayant une énergie très supérieure au E_g donnent lieu à un excès d'énergie pour les électrons, Cette énergie excessive sera perdue sous

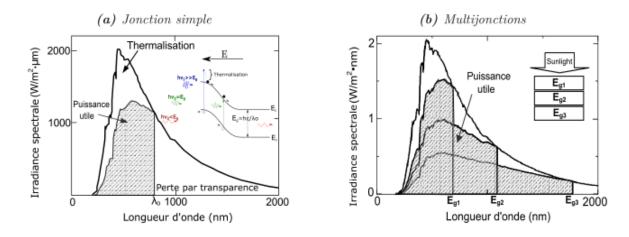


Figure 2.1: Effet PV dans (a) une jonction p-n simple et (b) multijonctions.

forme de chaleur, ce qu'on appelle la thermalisation. C'est-à-dire que l'énergie du photon absorbé n'a pas été totalement convertie en énergie électrique. Pour cette raison, un concept d'empiler plusieurs jonctions p-n avec différents Eg(multijonctions) peut surmonter cette problématique et convertir le maximum d'énergie optique en énergie électrique, comme montré dans la Figure 2.1(b).

2.3 Spectre solaire

Le soleil se comporte comme un corps noir dont la surface est à la température d'environ 5800 K. A la traversée de l'atmosphère, la lumière est absorbée et dispersée en particulier par les composants atmosphériques importants tels que le CO₂ et la vapeur d'eau (H₂O), de sorte que le spectre atteignant la surface de la terre soit atténué et changé dans la forme. Une mesure pour le spectre solaire est l'air Mass (noté *AM*). Elle est définie comme suit :

$$AM = \frac{1}{\cos \theta} \tag{2.1}$$

Où θ est l'angle entre le soleil et le zénith. Le spectre standard pour la latitude tempérée est AM 1.5 qui correspond à l'angle de 48 du vertical [1].

AM 1.5G donne une irradiance de 970 w/m², mais a été arrondi à 1 kW/m². La figure 2.2 représente le spectre solaire AM 1.5.

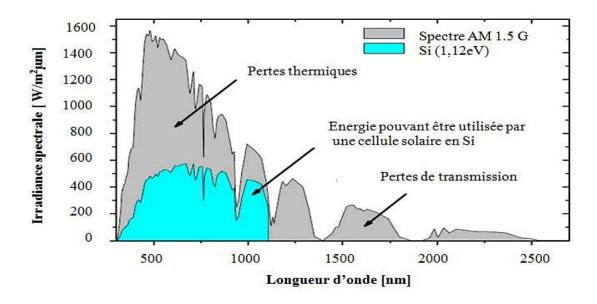


Figure 2.2 : Spectre d'émission solaire [2].

2.4 Génération de porteurs en excès par la lumière

Si on soumet un semi-conducteur à une excitation par la lumière, on induit des transitions électroniques entre la bande de valence et la bande de conduction et par suite il y'a création de paires électron-trou.

L'énergie nécessaire à la création d'une paire est apportée par un photon, cette énergie est donnée par la relation de Planck.

$$E = hv = \frac{hc}{\lambda} \quad \text{(eV)}$$

Tels que h la constante de Planck = $4.14\times10^{-15} \mathrm{eV.s}$, v la fréquence (s⁻¹), c la vitesse de la lumière = 3.10^{10} cm.s⁻¹ et λ la longueur d'onde (cm). Toute l'énergie du photon étant absorbée pour assurer la transition électronique, il faut que $hv > E_g$ pour créer une paire électron-trou. Cette condition peut se traduire en longueur d'onde par :

$$\lambda(\mu m) < \frac{1.24}{E_g(eV)} \tag{2.4}$$

Le calcul du taux de génération de paires électron-trou, G(x) (cm⁻³s⁻¹) s'effectue de la façon suivante. Appelant ϕ_o le flux de photons (cm⁻²s⁻¹) incidents sur la face éclairée du matériau et

 α (cm⁻¹) le coefficient d'absorption de la lumière par le matériau. A la profondeur x, ce taux de génération vaut:

$$G(x) = \alpha \cdot \phi_0 e^{-\alpha x} \tag{2.5}$$

La figure (2.3) donne les spectres d'absorption de certains matériaux employés dans la fabrication des cellules solaires. L'énergie minimale nécessaire au photon incident pour provoquer la transition électronique dépend de la largeur de bande de bande interdite E_g du matériau. A partir de la relation (2.2), on détermine un seuil d'absorption intrinsèque.

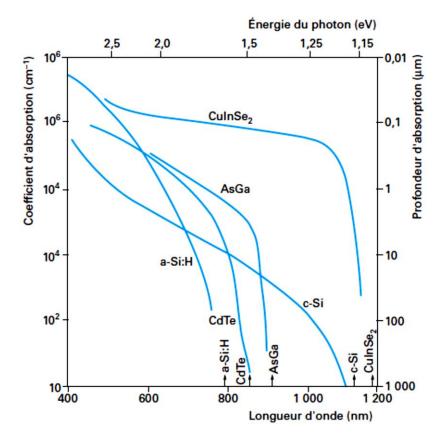


Figure 2.3: Absorption optique des semi-conducteurs à gap direct et indirect [3].

2.5 Fonctionnement d'une cellule photovoltaïque

La figure (2.4) montre le principe de fonctionnement de la cellule photovoltaïque avec les principales régions (Emetteur, Zone de Charge d'Espace et Base) dans lesquelles les photons incidents peuvent créer des porteurs libres. Le comportement de ces porteurs libres diffère

suivant la région de leur création. Dans les zones électriquement neutres (p) et (n), les porteurs minoritaires générés par les photons diffusent, ceux qui atteignent la zone de charge d'espace (ZCE) sont propulsés par le champ électrique E vers la région où ils deviennent majoritaires. Ces porteurs de charges contribuent donc au courant de la cellule photovoltaïque par leurs diffusions, cette composante est appelée courant de diffusion. Dans la zone de charge d'espace, les paires électrons-trous créées par les photons sont dissociées par le champ électrique, l'électron est propulsé vers la région de type n et le trou vers la région de type p, donnant naissance à un courant de génération [4].

Il convient donc de noter que la conversion de l'énergie solaire en électricité est possible si et seulement si trois phénomènes physiques de base ont lieu quasi simultanément :

- L'absorption d'un maximum de photons possible ;
- La transformation de l'énergie ainsi absorbée en charges électriques libres ;
- La collecte sans perte de ces derniers vers un circuit électrique extérieur.

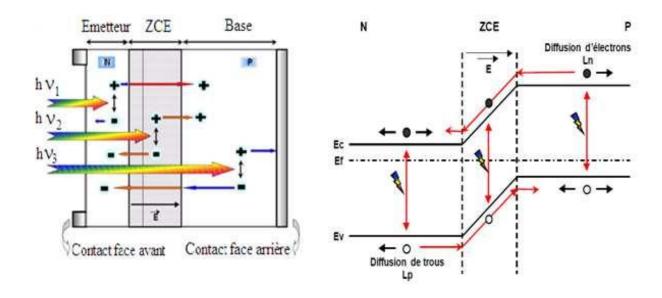


Figure 2.4 : Structure et diagramme de bande d'une cellule Photovoltaïque sous éclairement.

2.6 Caractéristiques électriques d'une cellule solaire

Une cellule solaire reliée à une résistance et soumise à l'éclairement solaire débite un courant qui va se répartir entre la résistance et sa structure interne de diode. Sa caractéristique I(V) correspond à la soustraction de la photo courant et du courant de la diode à l'obscurité par [5] :

$$I(V) = I_{obs}(V) - I_{ph} = I_{s}(e^{\frac{q.V}{K.T}} - 1) - I_{ph}$$
(2.6)

I_{ph} : la densité de courant photogénéré.

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

 I_s : le courant de saturation de la diode.

q: La caractéristique la charge élémentaire.

K : la constante de Boltzmann.

T: la température

La caractéristique d'une cellule à l'obscurité est identique à celle d'une diode. Nous avons représenté sur la figure (2.5) les deux caractéristiques courant-tension d'une cellule solaire à l'obscurité en pointillés, et sous illumination en trait plein. On remarque que la courbe sous illumination est simplement décalée par rapport à la première d'une valeur I_{cc} , qui traduit la génération constante du courant par la lumière. Cette valeur est appelée courant de court-circuit, puisque c'est le courant que génère la cellule sous lumière à tension nulle. La valeur V_{co} , à l'inverse, est la tension de circuit ouvert. Il représente en fait l'égalité du courant de génération par la lumière et du courant à l'obscurité [6].

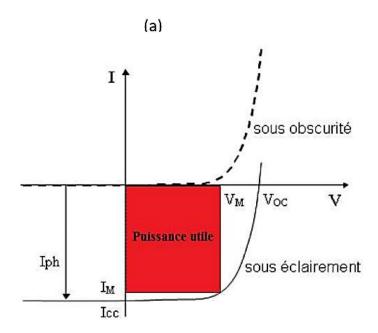


Figure2.5: Caractéristiques I(V) à l'obscurité et sous éclairement d'une cellule photovoltaïque.

2.7 Circuit équivalent d'une cellule photovoltaïque

La cellule solaire réelle peut être schématisée par la figure 2.6. Elle propose un modèle électrique de la cellule photovoltaïque. On y retrouve le générateur de courant I_{ph} , correspondant au courant photogénéré opposé au courant d'obscurité $I_{obs} = I_d$ de la diode polarisée en direct, ainsi que des résistances R_s et R_{sh} .

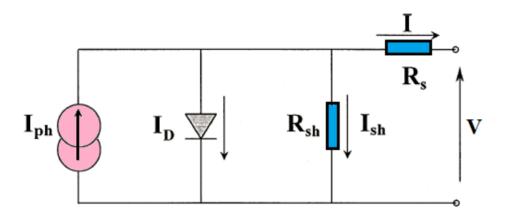


Figure 2.6 : Schéma équivalent d'une cellule solaire.

 R_S , la résistance série est due à la résistivité des différentes couches de la cellule : émetteur, base et contacts métalliques (en particulier leur interface avec le semi-conducteur). Cette résistance doit idéalement être le plus faible possible pour limiter son influence sur le courant de la cellule. Ceci peut être réalisé en diminuant la résistivité du matériau utilisé.

 R_{sh} , la résistance shunt (parallèle) traduit quant à elle, la présence d'un courant de fuite à travers l'émetteur causé par un défaut. Ceci est le cas lorsque la diffusion des contacts métalliques à haute température perce l'émetteur. Elle peut aussi être due à un court-circuit sur les bords de la cellule. Cette résistance devra être la plus élevée possible.

2.8 Paramètres d'une cellule solaire

2.8.1 Courant de court-circuit, I_{cc}

Le courant de court-circuit est:

$$I_{cc} = I_L - I_0 \left[e^{\frac{(R_s.lcc)}{V_T}} - 1 \right] - \frac{R_s.I_{cc}}{R_p}$$
 (2.7)

Pour la plupart des modules PV (dont la résistance est faible), et sous éclairement normal, on peut négliger le terme $I_0[\exp(R_s.I_{cc}/V_T)-1]$ devant I_L . L'expression approchée du courant de court-circuit est alors:

$$I_{cc} = I_L - \frac{R_S.I_{cc}}{R_P}$$
 (2.8)

Dans le cas idéal (R_S nulle et R_P infinie), le courant I_{cc} se confond avec le photocourant.

2.8.2 Tension de circuit ouvert, V_{co} :

C'est la tension pour laquelle le courant débité par le générateur PV est nul. C'est la tension maximale d'un générateur PV. De ce fait la tension en circuit ouvert s'écrira:

$$V_{co} = V_T \ln \left[(I_L - \frac{V_{co}}{\bar{R}_P}) \frac{1}{I_0} + 1 \right]$$
 (2.9)

Dans le cas d'un module PV idéal, sa valeur est:

$$V_{co} = V_T \ln \left[\frac{I_L}{I_0} + 1 \right] \tag{2.10}$$

Où:

$$\frac{V_{co}}{R_p I_0} << \frac{I_L}{I_0} + 1 \tag{2.11}$$

2.8.3 Facteur de forme, FF

La puissance fournie au circuit extérieur par une cellule photovoltaïque sous éclairement dépend de la résistance de charge (résistance externe placée aux bornes de la cellule). Cette puissance est maximale (notée $P_m = P_{max}$) pour un point de fonctionnement $P_m(I_m = I_{max}, V_m = V_{max})$ de la courbe courant-tension (figure 2.7). Le facteur de forme est défini par la relation suivante:

$$FF = \frac{P_m}{V_{co} I_{cc}} = \frac{V_m I_m}{V_{co} I_{cc}}$$
 (2.12)

2.8.4 Rendement de conversion η

Le rendement η de la cellule solaire exprimé en pourcentage, désigne le rendement de conversion en puissance. Il est défini comme étant le rapport entre la puissance maximale délivrée par la cellule et la puissance lumineuse incidente P_{in} .

$$\eta = \frac{P_m}{P_{in}} = \frac{FF.V_{co}.I_{cc}}{P_{in}} \tag{2.13}$$

A température et éclairage constants, le rendement d'une cellule solaire dépend de la charge dans le circuit électrique. En circuit ouvert $(P_m = \infty, I = 0, V = V_{co})$ ou en court-circuit $(R_C = 0, I = I_{cc}, V = 0)$, aucune énergie n'est transmise à l'extérieur. Entre ces deux extrêmes, il existe

une valeur optimale R_{opt} de la résistance de charge R_C , pour laquelle la puissance fournie par la cellule solaire à la résistance de charge est maximale notée $P_m = P_{max}$ (figure 2.7).

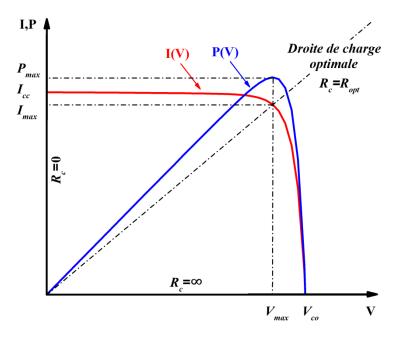


Figure 2.7 : Caractéristiques I(V) et P(V) d'une cellule solaire.

2.9 Réponse spectrale d'une cellule photovoltaïque

La réponse spectrale (*RS*) permet d'évaluer le rendement quantique d'une cellule solaire en fonction de la longueur d'onde de la lumière incidente. Cette mesure consiste à illuminer la cellule solaire avec un spot monochromatique que l'on fait varier dans la plage d'absorption du matériau (entre 350 et 1150 nm pour le silicium cristallin). La mesure du courant débité par la cellule en fonction de la longueur d'onde permet alors de connaître la réponse spectrale de la cellule à l'aide de la relation suivante :

$$RS(\lambda) = \frac{J(\lambda)}{P(\lambda)} \tag{2.14}$$

Selon la longueur d'onde du rayonnement incident, le courant mesuré sera plus ou moins élevé en fonction du Rendement Quantique Externe (*RQE*) de la cellule. Pour connaître celuici, il faut multiplier *RS* par un facteur :

$$RQE(\lambda) = RS(\lambda).\frac{hc}{q\lambda}$$
 (2.15)

Ceci permet d'obtenir le pourcentage d'électrons participant au photocourant par rapport au nombre de photons incidents.

Avec:

 $RQE(\lambda)$: Rendement Quantique Externe (%)

 $RS(\lambda)$: Réponse spectrale (A.W⁻¹)

h: Constante de Planck (kg.m².s⁻¹):

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

q : Charge élémentaire (C)

 λ : Longueur d'onde (m)

Le Rendement Quantique Interne (RQI) donne le pourcentage d'électrons participant au photocourant par rapport au nombre de photons qui ont été réellement absorbés dans la cellule:

$$RQI(\lambda) = \frac{RQE(\lambda)}{1 - R(\lambda)A(\lambda)T(\lambda)}$$
(2.16)

Avec:

 $ROI(\lambda)$: Rendement Quantique Interne (%)

 $RQE(\lambda)$: Rendement Quantique Externe (%)

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

 $A(\lambda)$: Absorption dans les couches non actives (%)

 $T(\lambda)$: Rayonnement transmis à travers la cellule (%)

2.10 Cellules photovoltaïques à base d'InGaN

L'idée d'utiliser l'alliage InGaN dans la fabrication des cellules solaire revient à J.Wu lorsde son étude intitulée «superior radiation resistance of lnGaNalloys : full-solar-spectrum photovoltaicmaterial» system en 2003, en exposant la particularité d'InGaN à avoir un gap

modulable et une résistance aux radiations. Depuis, plusieurs recherches se focalisaient sur ce type de matériau [7].

L'utilisation de l'alliage InGaN dans la fabrication des cellules photovoltaïques montre un fort potentiel. D'ailleurs, les recherches théoriques menées dans ce cadre ont donné des résultats très convaincants que ce soit pour des cellules multijonctions, hétérojonction ou homojonction. Dans ce qui va suivre, nous allons voir l'intérêt de cet alliage pour les cellules solaires à travers la démonstration des résultats obtenus par de nombreuses recherches.

2.10.1 Simples jonctions

Durant les années 2008 et 2009, plusieurs recherches ont été menées sur des cellules photovoltaïques à homojonction à base d'InGaN, ces recherches visaient spécialement à obtenir des meilleurs rendements expérimentaux. Du fait que ces derniers ne correspondaient pas aux rendements théoriques à cause de plusieurs facteurs comme la complexité d'introduire l'indium avec le GaN, la concentration très élevée d'électron dans le GaN ou la formation d'un contact ohmique entre le GaN de type p et le métal.

Cependant, des recherches faites par Chen, X et Cai, I. M sur les caractéristiques couranttension d'une cellule homojonction à base de l'InGaN par rapport à la concentration d'indium [8,9], ont démontré que les meilleurs rendements étaient obtenus avec une faible concentration d'indium, mais ces résultats n'étaient pas satisfaisants puisque la qualité cristalline de cet alliage posait toujours un problème. Une autre étude a été réalisée par S. W. Zeng sur une cellule homojonction à base d'InGaN dans le but de contourner le problème de la formation du contacte ohmique a rapporté des résultats plutôt satisfaisants, les résultats obtenus sont illustrés dans les figures (2.9) et (2.10) [11-10].

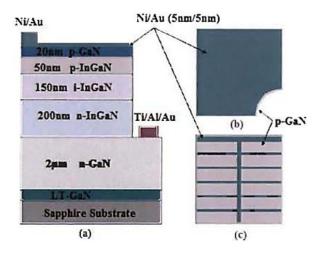


Figure 2.8 : Structure d'une cellule solaire PIN à double hétérojonction proposé par Zeng[11].

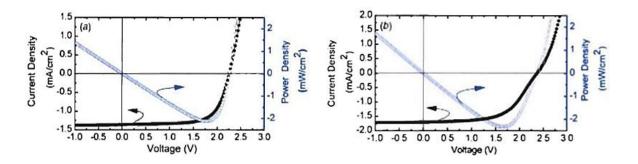


Figure 2.9 : Caractéristiques J, V et P, V de la cellule à base d'InGaN avec contact semi-transparent[11].

Figure 2.10 : Caractéristiques J, V et P, V de la cellule à base d'InGaN avec une grille[11].

En 2007, Jani et al [12] ont élaboré une cellule PV dont les caractéristiques sont une tension en circuit ouvert (V_{co}) de 2,4V, une densité de courant de court-circuit (I_{cc}) de 3,7 mA/cm² et un facteur de remplissage (FF) de 0,78.

Le schéma de la structure est présenté sur la figure 2.11.

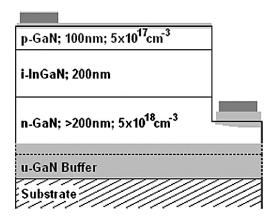


Figure 2.11: Schéma de la cellule solaire pin en double hétérojonction proposée par Jani et al.

En 2008, Neufeld et al. [13] ont également rapporté des résultats intéressants avec un V_{co} de 1,81V, un I_{cc} de 4,2mA/cm² et un FF de 0,753, donnant une puissance maximum de 5,7mW/cm² (rendement de 4,4%). Le schéma de la structure est donné sur la figure 2.12.

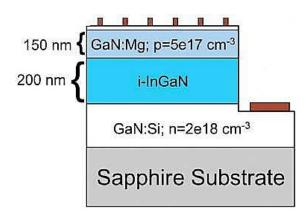


Figure 2.12 : Schéma de la cellule solaire pin en double hétérojonction proposée par Neufeld et al.

En 2012, Tran et al.ont étudié une cellule photovolta \ddot{q} que composée d'une couche active de 300nm d'In_{0.4}Ga_{0.6}N (Fig. 2.13) dont le rendement de conversion atteint 7%.

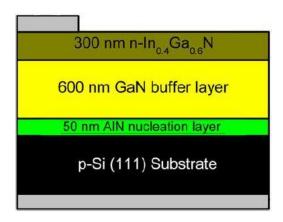


Figure 2.13: Schéma de la cellule solaire pin à hétérojonction n- In_{0,4}Ga_{0,6}N/p-Si proposée par Tran et al.

2.11 Cellule solaire multi-jonctions

Les cellules multi jonctions sont constituées par des couches de matériaux déposées l'une sur l'autre. Les matériaux utilisés sont les semiconducteurs III-V. Elles se composent de plusieurs jonctions p-n. Nous avons plusieurs cellules solaires avec des gaps décroissants pour élargir le spectre d'absorption (Figure 2.14). Puisque les cellules sont connectées en série, le courant de court-circuit, J_{cc} , correspond au plus petit des courants sortant des sous-cellules, et la tension de circuit ouvert, V_{co} , est la somme des V_{co} des sous-cellules. Cette structure permet d'améliorer le rendement par rapport aux cellules simple jonction.

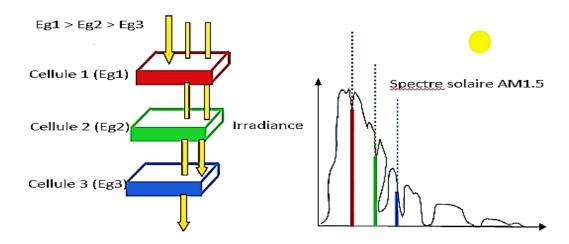


Figure 2.14: Schéma synoptique de la cellule solaire multi-jonctions.

En utilisant par exemple trois matériaux en InGaN de gap décroissants, il a été possible d'atteindre un rendement de 41.76% dans une cellule solaire multi-jonctions en InGaN sous une illumination AM1.5.Les résultats de simulation du rendement (η), de la densité de courant de court-circuit(J_{cc}), la tension en circuit-ouvert (V_{co}) et le facteur de forme (FF) des cellules solaires InGaN (SJ, DJ, TJ) sont montrés dans les caractéristiques J-V de la figure 2.15.

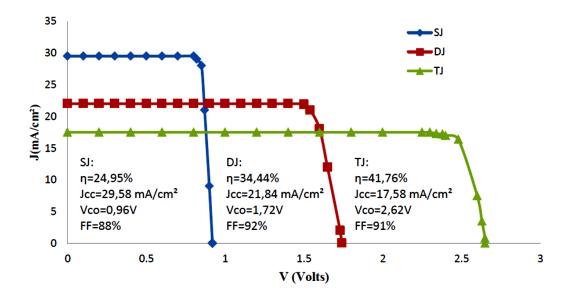


Figure 2.15 Rendement (η), densité de courant de court-circuit (J_{cc}), voltage en circuit-ouvert (V_{co}) et facteur de forme (FF) des cellules solaires de InGaN, cercle : simple jonction (SJ), carré : double jonctions (DJ), triangle : triple jonction (TJ).

2.12 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté le principe de fonctionnement et les caractéristiques principales d'une cellule photovoltaïque. Aussi on a déduit les différents paramètres électriques (rendement, facteur de forme, le courant de court-circuit, ...). Nous avons aussi présenté son circuit équivalent et l'état de l'art des cellules PV à base d'InGaN montre que ce matériau possède des avantages non négligeables, pour la réalisation de cellules solaires de haut rendement.

Références

- [1] M. Hepp, "Light Trapping in Quantum Well Solar cells Grown on Patterned substrate", Master of Science in semiconductor, university of London, 1998.
- [2] N. Oleksiy, "Simulation, fabrication et analyse des cellules photovoltaïque à contacts arrières interdigités", thèse de doctorat, Institue nationale des sciences appliquées, Lyon, 2005.
- [3] M. Ouddah, "Etude du silicium poreux destine aux cellules solaires", Thèse de magister, Université Mentouri, Constantine, 2009.
- [4]:http://www.techniques-ingenieur.fr/base-documentaire/energies-th4/sources-d-energie-hors-nucleaire-42215210/electricite-photovoltaique-be8578/
- [5] A. Bouloufa, "Etude et Caractérisation des Semiconducteurs Ternaires et Quaternaires Culni,,Ga,,Se2 par Spectroscopie Photoacoustique", Thèse de doctorat d'Etat, Université Ferhat Abbas, Sétif, 2007.
- [6] H.Mathieu, "Physique des semiconducteurs et des composants électroniques", 2ème édition, Masson1990.
- [7] 1. Wu, W. Walukiewicz, K. Yu, W. Shan, J. Ager Iii, E. Haller, et al., "Superior radiation resistance of In l-xGaxN alloys: Full-solar-spectrum photovoltaic material system," Journal of Applied Physics, vol. 94, pp. 6477-6482,2003.
- [8] S. Zeng, B. Zhang, J. Sun, 1. Cai, C. Chen, and J. Yu, "Substantial photo-response of InGaN p-i-n homojunction solar cells," Semiconductor Science and Technology, vol. 24, p. 055009,2009
- [9] X-m. Cai, S.-w. Zeng, and B.-p. Zhang, "Fabrication and characterization ofInGaN pin homojunction solar cell," Applied Physics Letters, vol. 95, p. 3504, 2009
- [10] X. Chen, K. Matthews, D. Hao, W. Schaff, and L. Eastman, "Growth, fabrication, and characterization of InGaN solar cells," physica status solidi (a), vol. 205, pp. 1103-1105, 2008.
- [11] O.Jani. Effect of phase separation on performance of III-V nitridesolarcells. Papier présenté à la22ème conférence auropéenne de l'énergie solaire photovoltaique, 2007.

[12] C. J. Neufeld, N. G. Toledo, S. C. Cruz, M. Iza, S. P. DenBaars, and U. K. Mishra. High quantum efficiencyInGaN/GaNsolarcellswith 2.95 eV band gap. Applied PhysicsLetters, 93(14):143502, 2008.

[13] Binh-TinhTran, Edward-Yi Chang, Hai-Dang Trinh, Ching-Ting Lee, Kartika Chandra Sahoo, Kung-Liang Lin, Man-Chi Huang, Hung-Wei Yu, Tien-Tung Luong, Chen- Chen Chung, and ChiLang Nguyen. Fabrication and characterization of n In0.4Ga0.6N/p Si solarcell. SolarEnergyMaterials and SolarCells, 102(0):208 – 211, 2012. <ce:title>Organic, Dyesensitized and Innovativeapproaches for Photovoltaic Applications</ce

Chapitre 3

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous présenterons le logiciel de simulation Tcad-Silvaco et comment l'utiliser pour développer des programmes de simulation.

3.2 Tcad-Silvaco

Silvaco est une entreprise qui se spécialise dans le développement de logiciels de simulation visant presque tous les aspects de la conception électronique moderne. Dans leur suite d'outil Tcad, l'entreprise fournit des capacités de modélisation et de simulation pour de simples circuits de type Spice tout le long du parcours de fabrication VLSI détaillé (figure 3.1). Des environnements conviviaux et un grand nombre d'options de modélisation différentes sont utilisés pour faciliter la conception. Les outils prévoient la création de modèles complexes et d'images structurales 3D.

Les phénomènes modélisés de la conductivité électrique à des processus détaillés de la croissance des couches et les propriétés des matériaux (les mobilités, les paramètres de recombinaison, les coefficients d'ionisation, les paramètres optiques) donnent un plus à la précision de la simulation.

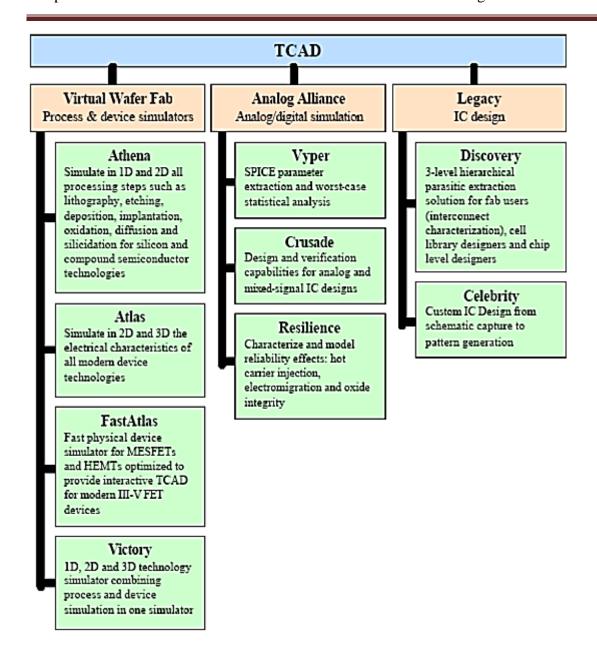


Figure 3.1: L'ensemble d'outils TCAD de Silvaco.

Sous Silvaco l'ensemble des outils de simulation et des outils interactifs permettant la conception et l'analyse de la plupart des dispositifs semiconducteurs s'appelle VWF (VirtualWafer Fab) comme indiqué dans la figure 3.2. Les composants de base de VWF sont :

- **1-**Les outils de simulation (VWF core tools). Ces outils simulent soit leurs processus de fabrication ou soit leurs comportements électriques. Les outils de simulation sont Athena, Atlas et SSuprem3.
- 2-Les outils interactifs (VWF interactive tools). Ces outils sont désignés pour être utilisés en mode interactif dans la construction d'un seul fichier d'entrée. En étant basé sur une interface utilisateur qui est graphique (Graphical User Interface, GUI), le travail de construction du fichier d'entrée devient plus efficace. Les outils interactifs peuvent être utilisés soit en relation avec un ensemble de fichiers, ou comme des composants intégrés dans l'environnant « VWFautomation tools ».
- **3**-Les outils d'automatisation (VWF automation tools). Ces outils permettent à l'utilisateur d'exécuter sur une grande échelle des études expérimentales pour créer des résultats pour l'analyse statistique suivante. Ces outils automatiques se servent de : la technologie de base de données répartie et des méthodes de logiciels de transmissions d'interprocessus.

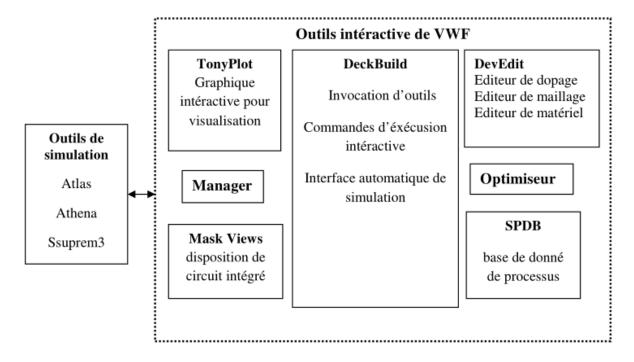


Figure 3.2 : Organigramme de la structure VWF.

Ainsi les modules de VWF sont les suivants :

> pour les outils interactifs VWF

- **❖ TonyPlot** : outil de visualisation et d'analyse graphique 1D et 2D des résultats des simulations
- ❖ Manager : outil de gestion des fichiers utilisés et créés par VWF
- **❖ Mask Views** : outil de dessin des masques (layouts)
- ❖ DeckBuild : environnement d'exécution interactif qui permet la simulation des processus et de dispositifs (mais principalement il est l'interface avec les outils de simulation)
- ❖ **DevEdit** : outil d'édition de structure, on peut créer de nouvelles structures ou même modifier des structures existantes, on peut définir des maillages ou raffiner les maillages existants
- **Optimiseur**: outil d'optimisation automatique
- ❖ SPDB : (Semiconductor Process Data Base), c'est un produit séparé, ça n'est pas un outil interactif, mais il peut être utilisé avec DeckBuild. Il a été conçu pour stocker un grand nombre de profils de dopage mesurés expérimentalement ainsi que les données qui décrivent les conditions des expériences.

Pour les outils de simulation :

- SSuprem3 : simulateur de procédé 1D avec prolongements simples de simulations des dispositifs
- ❖ Athena : simulateur 2D de procédés technologiques qui permet de simuler les différentes étapes effectuées en salles blanches et ainsi d'obtenir la structure du dispositif (couches constitutives, dimensions, géométrie) avec les profils de dopage
- ❖ Atlas: simulateur 2D ou 3D de dispositifs semiconducteurs qui permet d'obtenir leurs caractéristiques électriques (statiques ou dynamiques)

3.3 Atlas

Atlas est un simulateur de dispositifs semiconducteurs basé sur les principes physiques à deux et trois dimensions. Il prédit le comportement électrique associé à la structure physique dans des conditions spécifiées. Atlas parvient à ceci par le partitionnement du dispositif spécifié par un maillage de grille de deux ou trois dimensions. Atlas applique ensuite un ensemble

d'équations différentielles, fondées sur les lois de Maxwell, au maillage pour simuler le transport des porteurs de charge à travers la structure.

Avec Atlas l'interface est fournie par l'environnement exécutable Deckbuild de Silvaco via un fichier texte ASCII. La structure et les entrées de commandes à Atlas sont nécessaires pour simuler un dispositif. Les données de la structure contiennent les dimensions, les caractéristiques des matériaux, et les paramètres du maillage du dispositif étudié. Le fichier de commandes qui identifie les commandes Atlas va être exécuté pour obtenir les outputs désirés. L'ordre dans lequel les déclarations sont spécifiées à Atlas est important et doit être conforme aux étapes suivantes : caractéristiques structurales, spécifications des modèles de matériaux, sélection de la méthode numérique, spécification des solutions, puis l'analyse des résultats. De plus, l'ordre dans chacune de ces spécifications est également important. Par exemple, lors de l'identification des spécifications de la structure, l'ordre de commande nécessaire est : le maillage, les régions, les électrodes, puis le dopage. Le non-respect de cet ordre spécifie se traduira par des déclarations ignorées, des résultats des simulations erronée set /ou la cessation du programme. L'organigramme liant ATLAS à son environnement est présenté dans la figure (3.3).

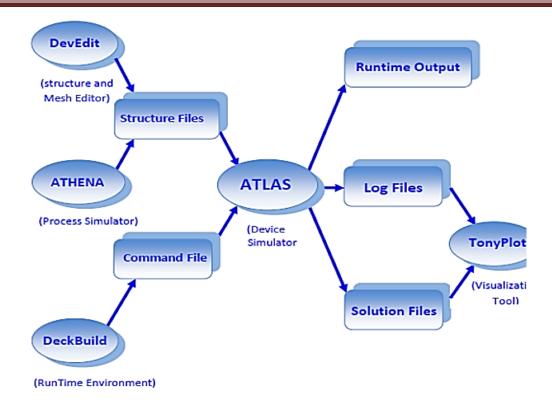


Figure 3.3 : Entrées et sorties d'Atlas.

3.3.1 Deckbuild

Deckbuild est un outil d'environnement d'exécution puissant qui permet à l'utilisateur de manière transparente d'aller de la simulation de processus à la simulation de dispositifs à l'extraction de modèles SPICE. Il est facile d'utiliser l'environnement de l'exécution pour exécuter des simulateurs de base tels qu'Atlas. Deckbuild contribue à créer des fichiers d'entrées à Atlas. Plusieurs fenêtres fournissent des ponts d'entrés à base de menus ou à base de textes pour les informations saisies. Il comprend également un grand nombre d'exemples pour tous les types de technologies. Autres outils de simulation, tels que Tonyplot, Devedit et Maskview peuvent également être invoqué à partir de Deckbuild. Les optimiseurs de Deckbuild contribuent à l'optimisation des cibles comme les dimensions structurelles et les paramètres des dispositifs après des tests électriques compliqués et des outputs intermédiaires Un exemple est montré dans la figure (3.4).

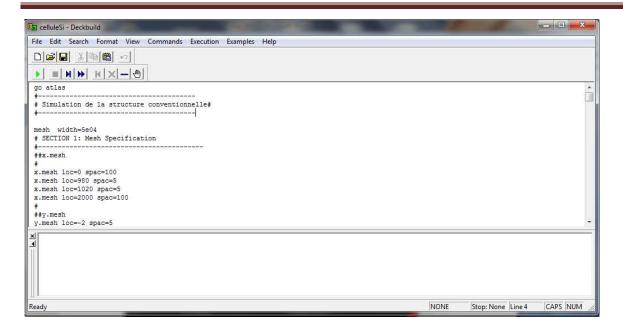


Figure 3.4 : L'interface de Deckbuild.

3.3.2 Tonyplot

C'est l'outil de visualisation commun pour les produits Silvaco-Tcad. Il fournit des fonctionnalités complètes pour la visualisation et l'analyse des outputs du simulateur. Les données peuvent être tracées selon l'envie de l'utilisateur, soit en données x-y 1D, contour de données 2D, des graphiques polaires ou des graphiques Smith. Les données mesurées peuvent également être importées et tracées dans les types mentionnés ci-dessus. Un exemple est montré dans la figure (3.5).

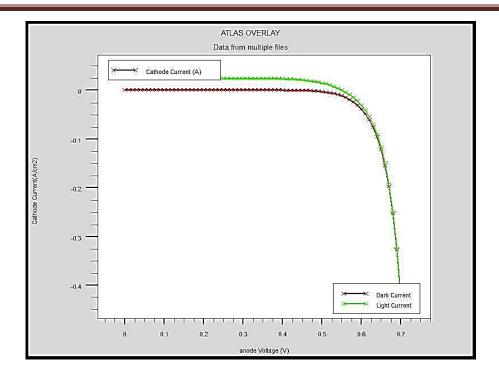


Figure 3.5 : Exemple de Tonyplot courbe IV.

3.4 Travailler avec ATLAS

Atlas peut accepter des fichiers de description de la structure à partir d'Athéna et DevEdit, et aussi de ses propres fichiers de commande. Le développement de la structure souhaitée dans ATLAS se fait en utilisant un langage de programmation déclaratif. Dans ce qui suit, on donne un bref aperçu comment une structure est construite et simulée dans ATLAS.

Le fichier d'entrée d'ATLAS contient un ordre de lignes de commande. Chaque ligne consiste en un nombre de déclaration qui identifie la commande et un jeu de paramètres. Le format général est : <DÉCLARATION><PARAMÈTRE> = <VALEUR>.

Par exemple: DOPING UNIFORM N.TYPE CONCENTRATION=1e16 REGION=1

La déclaration est DOPING les paramètres sont UNIFORM N.TYPE CONCENTRATION, et les valeurs sont 1e16 pour la concentration et l pour indiquer la région.

Les groupes de commande sont résumés dans le (tableau 3.1).

Groupe	Déclarations
Spécification de la Structure	MAILLE
	RÉGION
	ÉLECTRODE
	DOPAGE
Spécification des modèles des matériaux	MATÉRIELLE
	MODÈLES
	CONTACT
	INTERFACE
Numerical Method Selection	MÉTHODE
Spécification des solutions	LOG
	SOLVE
	LOAD
	SAVE
Analyse des Résultats	EXTRACT
	TONYPLOT

Tableau 3.1 : Groupes de commande d'atlas et déclarations primaires

3.5 Spécification de la structure

Silvaco Atlas reçoit les fichiers d'entrée qui contient les programmes de simulation deDeckBuilt. Atlas est appelé à exécuter ces derniers par la commande suivante : go atlas Le format des commandes d'Atlas est le suivant :

< STATEMENT><PARAMETER>=<VALUE>

Exemple: DOPING UNIFORM N. TYPE CONCENTRATION=1.0e16 REGION=1

La commande est DOPING, les paramètres sont UNIFORM, N. TYPE, REGION et CONCENTRATION.

La spécification de la structure est obtenue par identification du maillage, des régions, des électrodes et du dopage.

3.5.1 Mesh

Le maillage est une série de lignes horizontales et verticales espacées entre elles. La Figure (3.6) indique un maillage d'une structure. Le format général pour définir le maillage est :

X.MESH LOCATION=<VALUE> SPACING=<VALUE>

Y. MESH LOCATION=<VALUE> SPACING=<VALUE>

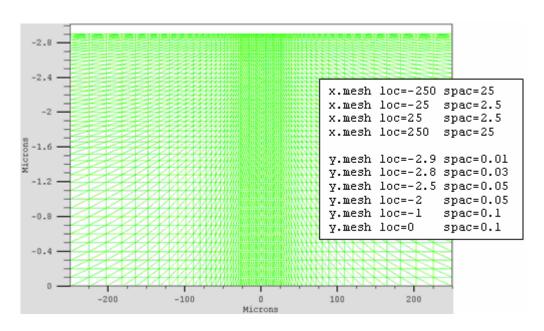


Figure 3.6: Définition du maillage avec Atlas.

3.5.2 Région

Après avoir déterminé le maillage, il est maintenant nécessaire de définir les régions. Le format pour définir les régions est comme suit :

REGION number=<intègre><material_type><position paramètres>

La Figure 3.7 montre les commandes utilisées pour identifier les régions. On distingue bien six régions, les limites de chaque région sont explicitement identifiées dans les axes x et y. Il reste à attribuer pour chaque région un matériau.

Sur la Figure (3.8) on peut voir les commandes utilisées pour définir le matériau utilisé pour chaque région. On utilise le code des couleurs pour identifier les matériaux (chaque matériau lui correspond une couleur). Les limites de chaque région sont marquées par des lignes verticales et horizontales.

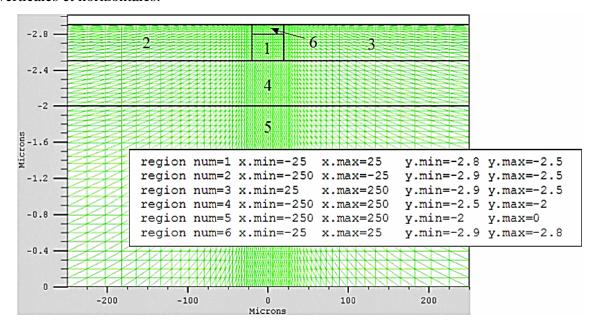


Figure 3.7: Définition des régions avec Atlas.

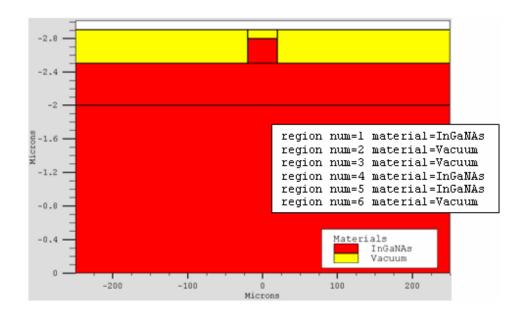


Figure 3.8 : Attribution de matériaux pour les régions avec Atlas.

3.5.3 Electrodes

La prochaine spécification de la structure correspond aux électrodes (Figure 3.9). Le nombre d'électrodes qu'on peut définir avec Silvaco Atlas peut alter jusqu'a 50. Le format pour définir les régions est le suivant :

ELECTRODE NAME=<électrode name><position paramètres>

Sur la figure la commande « Electrode » est utilisée pour définir l'anode et la cathode. Le matériau attribué à la cathode est l'or dont les dimensions sur les axes x et y correspondent à la région 6 définie précédemment. L'anode est définie au fond de la cellule tout au long de sa largeur à y = 0.

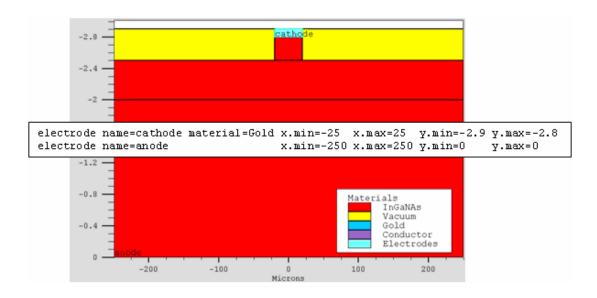


Figure 3.9 : Définition des électrodes avec Atlas.

3.5.4 Doping

La dernière spécification de la structure est le dopage. Le format pour définir le dopage est le suivant :

DOPING<distribution type><dopant type><position paramètres>

La Figure 3.10 montre les types et les niveaux de dopages. Le dopage peut être du type N ou du type P, la distribution peut être uniforme ou gaussienne.

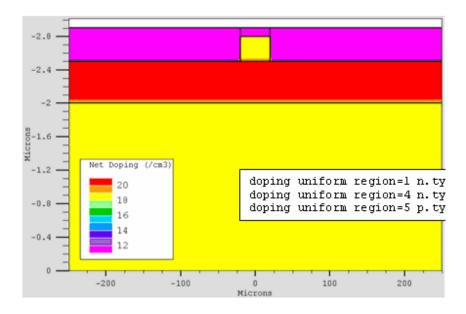


Figure 3.10: Types et niveau de dopage avec Atlas

3.6 Spécification des paramètres des matériaux et modèles physique

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

Matériaux :

Le format de la déclaration d'atlas pour les matériaux est comme suit :

MATERIAL < identification >< paramètre de matériau >

Plusieurs paramètres peuvent être identifiés pour le matériau d'une région donnée, par exemple : le gap d'énergie à la température ambiante (EG300), mobilités des électrons(MUN), la durée de vie de recombinaison d'électrons (TAUN0) et des trous (TAUP0), la densité de conduction à la température ambiante (NC300)...

Voici un exemple de déclaration des paramètres :

Materiel region=1 index.file=c-Si_nk.txt

Materiel region=1 taun0=112.1e-6 taup0=112.1e-6

Dans le premier exemple, on spécifie les indices de réfraction et d'extinction du matériau dela région 1 pour le silicium cristallin dans un fichier .txt dont le nom est c-Si_nk.

Dans le deuxième on spécifie les durées de vie des électrons et des trous.

>Modèles :

La syntaxe de la déclaration des modèles et comme suit :

MODEL < paramètres du modèle >

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

Exemple: SRH, FLDMOB et CONMOB

SRH est le modèle de recombinaison Shockley-Read-Hall.

CONMOB est le modèle de la mobilité dépendant de la concentration de dopage.

FLDMOB est le modèle de la mobilité dépendant du champ électrique.

≻Contacts:

Le contact détermine les attributions des électrodes. La syntaxe du contact est la suivante [5]:

Contact name = < name >< property_specification>

Voici un exemple des contacts déclaration :

Contact name = anode

Contact name = anode workfun = 4.74

➤ Interface:

Les limites des semiconducteurs ou des isolants sont déterminées par la déclaration «interface». La syntaxe est la suivante :

INTERFACE <paramètres><interface_dimensions >

L'exemple suivant montre l'utilisation de la déclaration d'interface :

Interface x.min=0 x.max=2000 y.min=0 y.max=0 s.n=1e3 s.p=1e3

Les valeurs max et min de déterminer les limites, s.n et s.p sont les vitesses de recombinaison superficielle aux interfaces des électrons et des trous

➤ Lumière:

Pour la simulation des cellules solaires, il est indispensable de spécifier la source de la lumière. Celui qui développe le programme peut accomplir ceci par une série de commandes. En voici un exemple :

beam num=1 x.origin =10 y.origin=-30 angle=90.0 power. file=AMOdis.spec reflects=1 front.refl back.refl quantum.eff=1.0

Cette déclaration définit le nombre des faisceaux lumineux qui est 1, l'origine du rayon pour des sources optiques 2D ; le x.origin et le y.origin sont les coordonnées x et y de l'origine du faisceau lumineux en microns. L'angle d'incidence de 90 degrés indique que le rayon est perpendiculaire à la surface éclairée de la cellule solaire.

power.file spécifie la source spectrale de la lumière en indiquant le nom d'un fichier d'extension spec qui contient les valeurs des intensités du spectre utilise en fonction de leurs longueurs d'onde.

Le paramètre reflects=1 donne le nombre de réflexions du faisceau lumineux. La déclaration back.refl permet au rayon lumineux de se réfléchir en face arrière de la cellule.

3.7 Sélection de la méthode numérique

Après la spécification des modèles des matériaux, le choix de méthode numérique doit être spécifié. La seule déclaration qui s'applique à la sélection de la méthode numérique est la déclaration Méthode.

Une variété de méthodes numériques existe pour calculer les solutions :

La méthode découplée (Gummel): la méthode Gummel résout les équations pour chaque inconnues en gardant tous les autres inconnues constante. Le processus est répété jusqu'à ce qu'il y soit une solution stable.

La méthode couplée (Newton) : la méthode de Newton résout les équations pour toutes les inconnues simultanément.

Block : la méthode des blocks résout certaines équations avec la méthode Gummel et des autres avec la méthode de Newton.

L'exemple suivant montre l'utilisation de la déclaration de la méthode :

Method newton trap

La méthode est celle de Newton, trap c'est pour diviser le pas de la tension. Cette division peut être limitée par un nombre par exemple trap=20, s'il ya un problème de convergence.

3.8 Spécification de Solution

Après avoir terminé la sélection de la méthode numérique, la prochaine étape est la spécification de la solution. La spécification de la solution se décompose en ces déclarations Log, Solve, Load, et Save.

>Log:

Log enregistre toutes les caractéristiques finales dans un fichier. Des données DC, transitoire, ou AC sont générés par la déclaration Solve après l'enregistrement d'une déclaration Log. L'exemple suivant montre un exemple de la déclaration Log.

Log outf=IVdark_.log

Dans cet exemple, la déclaration de log sauvegarde les données courant-tension dans fichier IV dark_.log

>Solve:

La déclaration Solve suit la déclaration Log, Solve effectue une solution pour un ou plusieurs points de polarisation. Cette déclaration est sous le format suivant :

Solve < bias_points>

Par exemple:

Solve vanode=0 vstep=0.01 vfnal=0.4 name=anode

➤Load et Save :

La commande Load introduit les solutions précédentes à partir de fichiers comme valeurs initiales à d'autres points de polarisation. L'instruction Save introduit toutes les informations attribuées à un point nœud dans un fichier output (fichier de sortie).

Les instructions pour load et save sont comme suit:

Load infile=< filename>

Save outfile=< filename>

3.9 Analyse des Résultats

Une fois que la solution est trouvée pour un problème du dispositif semiconducteur, les informations peuvent être affichées graphiquement par TonyPlot. En outre, les paramètres du dispositif peuvent être extraits par la déclaration Extract.

Dans l'exemple ci-dessous, la déclaration Extract obtient la puissance d'une cellule solaire. Cette information est sauvegardée dans le fichier power.dat.

Ensuite, Tonyplot trace l'information contenue dans le fichier power.dat.

Extract name="power" curve(v."anode",(v."anode"*i."cathode"))

Outfile= "powerlight.dat"

Tonyplot "powerlight.dat"

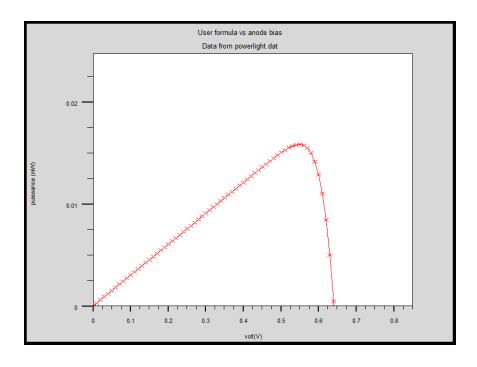


Figure 3.11: Exemple de Tonyplot courbe PV.

3.10 Conclusion

Ce chapitre a présenté quelques informations de base en programmation par Silvaco-Atlas et plusieurs aspects spécifiques à la méthodologie de programmation ont été présentés comprenant la structure de programme, la spécification de la structure du composant électronique, spécification des paramètres des matériaux, modèles physiques et la sélection de la méthode numérique de résolution.

Référence

[1] ATLAS User's Manual, Device Simulation Software, Version 5.20.2.R, SILVACO International, Santa Clara, CA, 2015.

Chapitre 4

4.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons simuler une cellule solaire p(GaN)-i(InGaN)-n(GaN) par le logiciel Atlas-Silvaco. A partir des caractéristiques (J-V) fournies par Atlas-Silvaco, nous allons déterminer les valeurs des paramètres photovoltaïques caractérisant la cellule solaire tels que le courant de court circuit, la tension en circuit ouvert, le facteur de forme et le rendement. Nous allons aussi étudier l'influence de la fraction molaire x du matériau In_xGa_{1-x} N, l'épaisseur de la couche intrinsèque en InGaN et la température sur les paramètres photovoltaïques de cette cellule solaire.

4.2 Structure de la cellule solaire en InGaN dans Atlas. Silvaco

La cellule à étudier a une structure p-i-n en InGaN/ GaN avec deux électrodes (l'anode en agent et la cathode en aluminium). Les deux couches p et n sont réalisées avec le matériau GaN et la couche i avec le matériau In_{0.3}Ga_{0.7}N. La construction de cette structure dans le simulateur Atlas consiste en quatre étapes: définitions du maillage, des régions, des électrodes et du dopage. Les couches en GaN de type p et n sont dopées avec des concentrations des accepteurs et des donneurs de l'ordre de 5×10¹⁸ et 2×10¹⁹ cm⁻³ respectivement. Cette structure est représentée dans la figure 4.1.

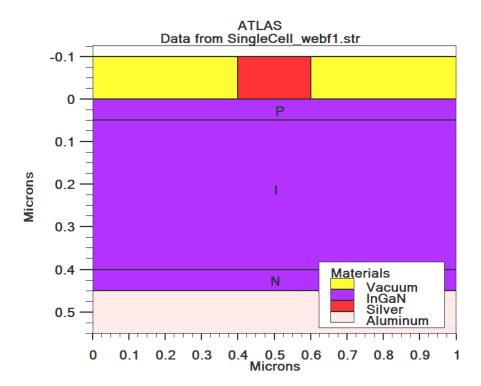


Figure 4.1 : Structure p-i-n de la cellule solaire en InGaN/GaN simulée dans Atlas-Silvaco.

4.3 Modèles et paramètres de simulation

L'Energie de gap [1]:

$$E_g^{In_xGa_{1-x}N} = x.E_g^{InN} + (1-x).E_g^{GaN} - 1.43.(1-x).x$$
(4.1)

Avec x=0.3, E_g^{InN} =0.7 eV, E_g^{GaN} =3.42 eV, le gap d'énergie du matériau In_{0.7}Ga_{0.3}N est de l'ordre de 2.3 eV.

L'affinité électronique [2] :

$$\chi(In_xGa_{1-x}N) = 4.1 + 0.7(3.42 - E_g^{In_xGa_{1-x}N})$$
(4.2)

Pour x=0.3, l'affinité électronique est de l'ordre de 4.884 eV.

La permittivité [3]:

$$\varepsilon(In_{x}Ga_{1-x}N) = 15.3x + 8.9(1-x) \tag{4.3}$$

Pour x=0.3, la permittivité est de l'ordre de :

$$\varepsilon(GaN) = 4.31 \text{ eV}.$$

$$\varepsilon(In_{\nu}Ga_{1-\nu}N) = 5.18 \text{ eV}.$$

La mobilité:

Pour notre étude, on a utilisé le modèle de Caughey-Thomas, la mobilité dépendante de la concentration des porteurs définie par l'expression [4] :

$$\mu = \mu \min^{\beta} + \frac{\mu_{\text{max}}^{\alpha} - \mu_{\text{min}}^{\beta}}{1 + \left(\frac{N_{tot}}{N_{ref}}\right)^{\gamma}}$$

$$(4.4)$$

Où N_{tot} la concentration du dopage. μ_{min} , μ_{max} , N_{ref} et γ des paramètres spécifiques du matériau. Les valeurs de ces paramètres sont celles par défaut dans Atlas-Silvaco. La mobilité des trous est de $10 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$.

Le coefficient d'absorption [5]:

$$\alpha(\lambda) = 2.2 \times 10^5 \sqrt{\frac{1.24}{\lambda} - E_g} \tag{4.5}$$

L'indice de réfraction n_r est calculé par le modèle Adachi et donné par [3]:

$$n_r(\omega) = \sqrt{A \left(\frac{h\omega}{E_g}\right)^{-2} \left\{2 - \sqrt{1 + \frac{h\omega}{E_g}} - \sqrt{1 - \frac{h\omega}{E_g}}\right\} + B}$$
 (4.6)

Où ω est la fréquence optique, A et B sont des paramètres dépendants de la composition x définis par:

$$A(x) = 9.827(1+x) - 53.57x \tag{4.7}$$

$$B(x) = 2.736(1+x) - 9.19x (4.8)$$

Recombinaison:

Nous avons considéré le modèle Shockley-Read-Hall (**SRH**) pour le calcul du taux de recombinaison avec la durée de vie des électrons et des trous est de 6.5 ns. Le modèle Auger avec les paramètres Auger pour les électrons et les trous de l'ordre de 10^{-34} cm⁶ s⁻¹ et le modèle de recombinaison radiative avec le paramètre optique de $3x10^{-11}$ cm³.s¹ sont aussi considérés dans la simulation.

4.4 Résultats de simulation et discussions

Caractéristiques I-V et P-V de la cellule pin InGaN/GaN

Les caractéristiques J-V et P-V de la cellule pin en InGaN/GaN sont représentées dans la figure 4.2. D'après ces deux caractéristiques, nous avons calculé les paramètres de la cellule solaire qui sont groupés dans le tableau 4.1.

Tableau 4.1 Paramètres photovoltaïques de la cellule solaire en InGaN/GaN.

Paramètres	J_{cc}	V_{co}	I_{m}	V _m	P _m	FF	η (%)
	(mA/cm^2)	(V)	(mA/cm^2)	(V)	(mW/cm^2)	(%)	
Valeurs	6.55	1.83	64.62	1.6	10.34	85.88	10.34

Ces paramètres photovoltaïques sont en accort avec ceux trouvés dans les références [6,7].

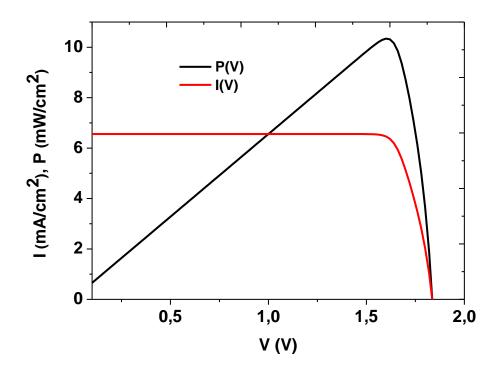


Figure 4.2 : Caractéristique J(V) et P(V) de la cellule solaire en InGaN/GaN.

4.4.1 Influence de la fraction molaire sur la cellule solaire InGaN/GaN

Nous avons fixé les épaisseurs et les concentrations de dopage des couches p, i et n. Nous avons pris la concentration du dopage de la couche p, $N_a = 5 \times 10^{18}$ cm⁻³ avec une épaisseur de 0.05 μ m. La concentration du dopage de la couche n, $N_d = 2 \times 10^{19}$ cm⁻³ avec une épaisseur de 0.05 μ m. Nous avons varié la fraction molaire entre 0.1 et 0.62. Figure 4.3 représente la variation du gap d'énergie avec la fraction molaire x. le gap d'énergie diminue à partir de 2.95 eV pour x=0.1 jusqu'à 1.63 eV pour x=0.62.

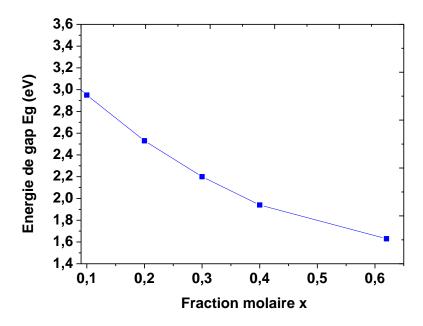


Figure 4.3 : variation de l'énergie de gap en fonction la fraction molaire x de l'InGaN/GaN.

Figure 4.4 représente la caractéristique J(V) de la cellule solaire InGaN/GaN avec la variation de la fraction molaire x. Nous remarquons que l'effet principal de l'augmentation de x de la couche en InGaN consiste à la diminution de la tension en circuit ouvert et l'accroissement du courant de court-circuit. La diminution de la largeur du gap fait diminuer la tension en circuit ouvert qui atteint la valeur 2.54 V en x=0.1 et la valeur 1.35 V en x=0.62 tandis qu'il y'a augmentation du courant de court circuit de 1.34 mA/cm² pour x=0.1 et 10.73 mA/cm² pour x=0.4 après il y'a diminution du courant qui est égal à 0.007 mA/cm² pour x=0.62. L'augmentation du courant est due à l'accroissement du nombre de photons absorbés.

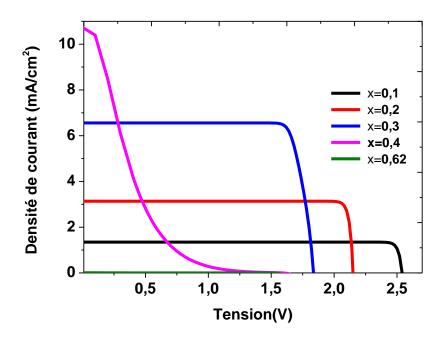


Figure 4.4 : Caractéristiques J(V) en fonction de la fraction molaire x de l'InGaN/GaN.

Fig. 4.5 représente la variation des paramètres photovoltaïques : J_{cc} (mAcm⁻²), V_{co} (V), FF (%) et η (%) de la cellule solaire en fonction de la fraction molaire de la couche i. Le courant encourt-circuit I_{cc} Augmente rapidement à partir de 1.34 mA/cm² jusqu'à 10.73 mA/cm² pour une variation de la fraction molaire x=0.1 jusqu'à x=0.4 puis diminue pour atteindre 0.007 mA/cm² pour la fraction molaire x=0.62 .La tension en circuit ouvert V_{oc} diminue de 2.54V jusqu'à 1.35 V pour la fraction molaire x=0.1 jusqu'à x=0.62. FF diminue de 94.36% jusqu'à 6.7% pour la fraction molaire x=0.1 jusqu'à x=0.62 . η augmente à partir de 3.22% jusqu'à 6.31% pour la fraction molaire x=0.1 jusqu'à x=0.3 où il atteint la valeur maximale 10.34% puis diminue pour atteindre 0.0006% pour la fraction molaire x=0.62.

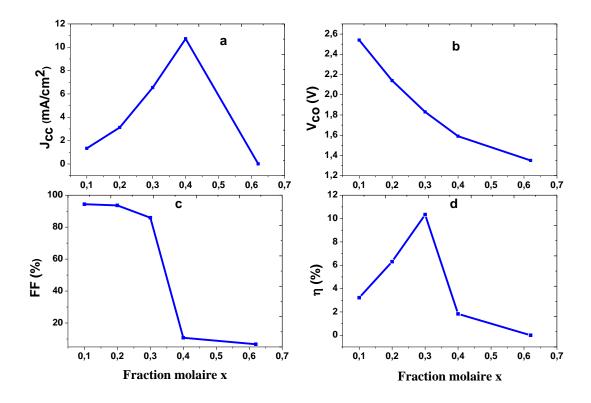


Figure 4.5 : la variation des paramètres photovoltaïques : (a)- J_{cc} (mAcm⁻²),(b)-V_{co} (V), (c)-FF (%) et(d)-η (%) de la cellule solaire InGaN/GaN en fonction de la fraction molaire de la couche i..

4.4.2 Effet de l'épaisseur de la couche intrinsèque sur la cellule solaire InGaN/GaN

L'épaisseur de la couche en InGaN est variée de 0.2 nm à 1.2 nm tandis que l'épaisseur des couches en GaN est maintenues constante.

Figure 4.6 représente J(V) de la cellule solaire InGaN/GaN avec la variation de l'épaisseur de la couche intrinsèque. Nous remarquons que l'effet principal de l'augmentation de l'épaisseur de la couche en InGaN consiste à la diminution de la tension en circuit ouvert et l'accroissement du courant de court-circuit.

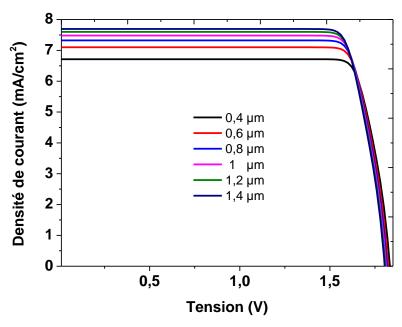


Figure 4.6 : Caractéristiques I(V) en fonction de l'épaisseur de l'InGaN/GaN.

Fig. 4.7 représente la variation des paramètres photovoltaïques : Jcc (mAcm⁻²), Vco (V), FF (%), η (%) de la cellule solaire en fonction de l'épaisseur de couche i. Le courant en court-circuit I_{cc} Augmente lentement de 6.71 mA/cm² pour l'épaisseur= 0.4 μ m à 7.69 mA/cm² pour l'épaisseur=1.4 μ m .La tension en circuit ouvert V_{oc} diminue de (1.83 V) pour l'épaisseur=0.4 μ m jusqu'à (1.8 V) pour l'épaisseur=1.4 μ m. FF diminue de (85.71%) pour l'épaisseur=0.4 μ m jusqu'à (84.4%) pour l'épaisseur=1.4 μ m. η augmente de (10.54%) pour l'épaisseur=0.4 μ m jusqu'à (11.71 %) pour l'épaisseur=1.4 μ m. L'élargissement de la couche intrinsèque conduit à l'élargissement de la région de la génération des photoporteurs et le nombre de photoporteurs générés par la lumière augmente. Par conséquent le courant de court circuit augmente, la tension en circuit ouvert et le rendement augmentent aussi.

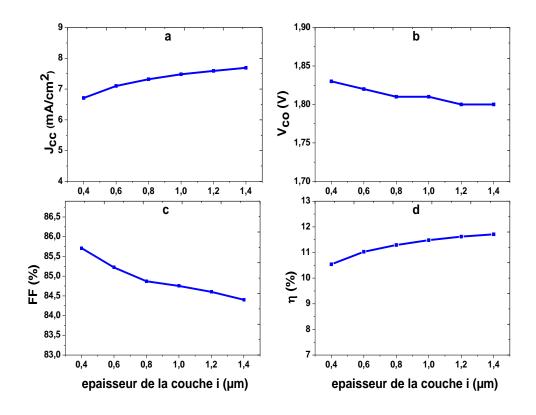


Figure 4.7 : la variation des paramètres photovoltaïques : (a)- J_{cc} (mAcm⁻²),(b)-V_{co} (V), (c)-FF (%) et(d)-η (%) de la cellule solaire InGaN/GaN en fonction de l'épaisseur de couche i.

4.4.3 Effet de la température sur la cellule solaire

Le rendement d'une cellule solaire dépend de l'éclairement et grandement de la température. La température est un paramètre important puisque les cellules sont exposées au rayonnement solaire, susceptible de les échauffer. De plus, une partie du rayonnement absorbé n'est pas convertie en énergie électrique : elle se dissipe sous forme de chaleur. C'est pourquoi la température d'une cellule est toujours plus élevée que la température ambiante.

Figure 4.8 représente la variation du gap d'énergie de la couche en InGaN en fonction de la température pour une fraction molaire de la couche intrinsèque 0.3. La gamme de température choisie est entre [280 K-343 K]. Le gap d'énergie reste constant à 2.2 eV à partir de 280 K jusqu'à 300 K. Puis il diminue à2.19 eV à une température de 310 K jusqu'à 330 K. A la température 343 K l'énergie de gap est au niveau le plus bas et atteint 2.18 eV.

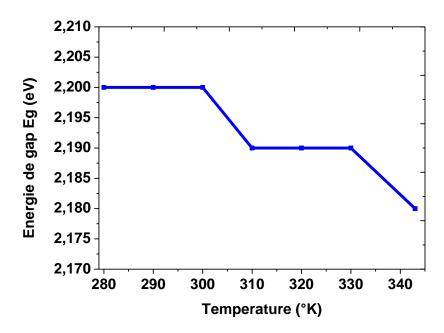


Figure 4.8 : Variation de l'énergie du gap du matériau InGaN avec la température pour une fraction molaire x=0.3.

Figure 4.9 représente la caractéristique J(V) de la cellule solaire InGaN/GaN avec la variation de la température. Nous remarquons que l'effet principal de l'augmentation de T de la couche en InGaN consiste à la diminution de la tension en circuit ouvert tandis que le courant de court-circuit est constant. L'augmentation de la température fait diminuer la tension en circuit ouvert qui atteint la valeur 1.87 V en T=280 K à la valeur 1.75V en T=343 K.

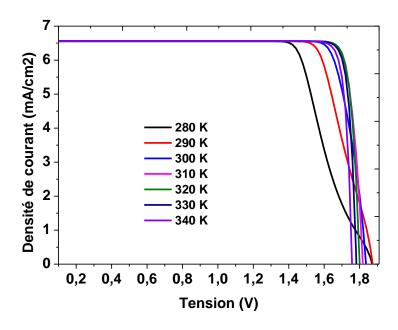


Figure 4.9 : Caractéristiques J(V) en fonction de la Température de l'InGaN.

Fig. 4.10 représente la variation des paramètres photovoltaïques : J_{cc} (mAcm⁻²), V_{co} (V), FF (%) et n (%) de la cellule solaire en fonction de la température. Le courant encourt-circuit I_{cc} reste constant à 6.55 mA.cm⁻².La tension en circuit ouvert V_{oc} diminuede 1.87 jusqu'à 1.75 V pour les températures de 280 K vers 343 K. Cette influence s'explique par la forte augmentation de courant de saturation en fonction de la température et la diminution de la largeur de la bande interdite ($I_s \sim n_i^2$) et par conséquent la diminution de la tension en circuit ouvert d'après l'équation (II.10). FF augmente rapidement à partir de (74.73 %) j'usqu'a (89.79 %) pour les températures de 280 K jusqu'à 310K et à partir de la température 320 Kil commence à se stabiliser progressivement(91 %), n augmente rapidement à partir de (9.17%) jusqu'à (10.74 %) pour les températures de 280 K jusqu'à 320 K. Puis le rendement diminue pour atteindre (10.52 %) à une température 343 K. L'augmentation du rendement est dù principalement à l'accroissemet du facteur de forme. Nous pouvons conclure que l'augmentantation de la température de la cellule photovoltaïque InGaN/GaN présente une dégradation de la tension de circuit-ouvert et une augmentation du facteur de forme et du rendement qui séleve de 9.17 % à 10.52% entre 280 et 320 K. Au delà de cette température le rendement de la cellule solaire InGaN/GaN commence à se dégrader.

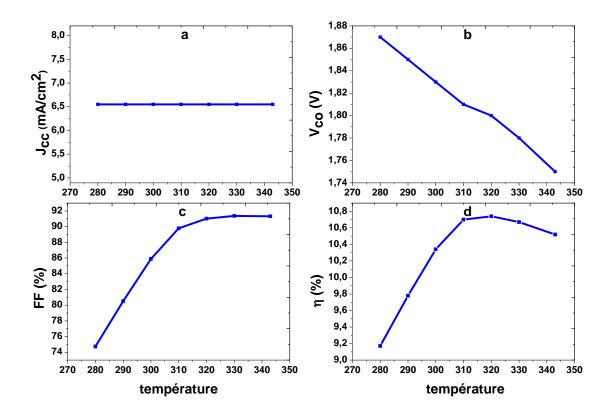


Figure 4.10 : la variation des paramètres photovoltaïques : (a)- J_{cc} (mAcm⁻²),(b)- V_{co} (V), (c)-FF (%) et(d)- η (%) de la cellule solaire InGaN/GaN en fonction de la température obtenus par simulation.

4.4.4 Conclusion

Ce chapitre a pour but de présenter les résultats de la simulation numérique par Atlas d'une cellule solaire en InGaN/GaN. Au début, nous avons présenté la structure pin de notre cellule solaire. Après cela, nous avons effectué la simulation numérique de cette structure pour déterminer les propriétés électriques telles que le rendement de conversion. Nous avons aussi étudié l'influence de la fraction molaire de la couche intrinsèque, son épaisseur et la température sur la cellule solaire.

Référence :

- [1] Wu J and Walukiewicz W 2003 Band gaps of InN and group III nitride alloys Superlattices *Microstruct*. 34 63–75
- [2] X. Zhang, X. Wang, H. Xiao et al., "Simulation of In_{0.65}Ga_{0.35} Nsingle-junction solar cell," *Journal of PhysicsD: Applied Physics*, vol. 40, no. 23, pp. 7335–7338, 2007.
- [3] ATLAS User's Manual, Device Simulation Software, Version 5.20.2.R, SILVACO International, Santa Clara, CA, 2015.
- [4] Mnatsakanov, T. T., Levinshtein, M. E., Pomortseva, L. I., Yurkov, S. N., Simin, G. S. and Asif Khan, M., "Carrier mobility model for GaN" Solid-State Electron. 47, 111-115 (2003).
- [5] Li, N., "Simulation and Analysis of GaN-based Photoelectronic Devices," Dissertation (in Chinese), Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 3(2005).
- [6] B. Wang et al.: Influence of band tail defects on PIN InGaN solar cells. P hys. Status Solidi C 13, No. 5–6, 301–303 (2016).
- [7] M Nawaz and A Ahmad. Semicond. Sci. Technol. **27** (2012) 035019.

Conclusion générale

CONCLUSION GENERALE

Ce travail consiste à étudier et simuler une cellule solaire de structure p-i-n en InGaN/GaN Afin que cette cellule solaire absorbe le maximum du rayonnement solaire et de délivrer aussi un maximum d'énergie électrique, Nous avons aussi étudié l'influence de la fraction molaire x du matériau In_xGa_{1-x} N, l'épaisseur de la couche intrinsèque en InGaN et la température sur les paramètres photovoltaïques de cette cellule solaire. Ce travail de simulation est effectué par le logiciel Atlas-Silvaco conçu pour la simulation des composants électroniques à semiconducteurs.

Dans le premier chapitre, nous avons présenté les caractéristiques cristallines, électriques et optiques du matériau InGaN. Dans le deuxième chapitre, nous avons présenté le principe de fonctionnement et les caractéristiques principales d'une cellule photovoltaïque en général et la cellule solaire en InGaN en particulier. Le troisième chapitre, décrit le module de simulation Atlas du logiciel Tcad-Silvaco, qui est utilisé pour la simulation électrique à partir de la structure de la cellule solaire en InGaN/GaN. Notre travail de simulation est présenté dans le quatrième chapitre.

Au début, nous avons présenté la structure p i n de notre cellule solaire et les modèles et les paramètres de modélisation. Après cela, nous avons effectué la simulation numérique de cette structure pour déterminer les paramètres photovoltaïques de cette cellule en InGaN/GaN. Les valeurs obtenues par simulation sont : $J_{cc}=6.55~\text{mA/cm}^2,~V_{co}=1.83\text{V},~P_m=10.34\text{mW/cm}^2,~FF=85.88\%$ et η =10.34% pour une fraction molaire x=0.3 et une épaisseur de la couche intrinsèque de 0.3 μ m.

Nous avons aussi étudié l'influence de la fraction molaire de la couche intrinsèque, son épaisseur et la température sur la cellule solaire InGaN/GaN.

D'Après l'étude de l'influence de la fraction molaire, nous avons trouvé que η augmente à partir de 3.22% jusqu'à 6.31% pour la fraction molaire x=0.1 jusqu'à x=0.3 où il atteint la valeur maximale 10.34% puis diminue pour atteindre 0.0006% pour la fraction molaire x=0.62.

L'accroissement de l'épaisseur de la couche intrinsèque fait augmenter η et il attaint (11.71 %) pour l'épaisseur=1.4 μ m.

Nous avons aussi conclu que l'augmentantation de la température de la cellule photovoltaïque InGaN/GaN présente une dégradation de la tension de circuit-ouvert et une augmentation du facteur de forme et du rendement qui séleve de 9.17 % à 10.52% entre 280

et 320 K. Au delà de cette température le rendement de la cellule solaire InGaN/GaN commence à se dégrader.