

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la recherche scientifique

Université Mohamed Khider Biskra

Faculté des sciences exactes et des sciences de la nature et de la vie

Département des Sciences de la Matière

N° d'ordre :

Série :



T H È S E

Présentée par

LAZNEK Samira

Pour obtenir le diplôme de *Doctorat en Sciences*

Option : *Semi-conducteurs*

Simulation numérique des caractéristiques électriques d'une cellule solaire p-i-n à puits quantiques à base de mixture d'Aluminium et d'Arséniure de Galium

Soutenue le : 02/05/2019 devant la commission d'examen

COMPOSITION DU JURY

Pr. ATTAF Abdallah	Professeur	Université de Biskra	Président
Pr. MEFTAH Afak	Professeur	Université de Biskra	Rapporteur
Pr. DEHIMI Lakhdar	Professeur	Université de Batna	Examineur
Pr. GUEDDIM Ahmed	Professeur	Université de Djelfa	Examineur

Remerciements

Le travail que nous présentons dans ce mémoire a été effectué au sein du Laboratoire des Matériaux Semi-conducteurs et Métalliques (LMSM) de l'Université de Biskra.

Je tiens tout d'abord à remercier mon directrice de thèse, Madame **Meftah Afak**, Professeur de l'Université Mohamed Khider - Biskra, pour avoir proposé et dirigé ce travail de recherche. Son soutien, sa disponibilité et ses précieux conseils, tous au long de cette thèse, m'ont permis d'acquérir une grande confiance et de mener à terme ce travail de recherche.

J'adresse mes sincères remerciements au monsieur **ATTAF Abdallah**, professeur à l'université de BISKRA, qui m'a fait l'honneur d'accepter de présider le Jury de cette thèse.

Je tiens à adresser mes vifs remerciements et l'expression de mon profond respect à Monsieur **DEHIMI Lakhdar**, Professeur à l'Université de Batna et à Monsieur **GUEDDIM Ahmed**, Professeur à l'Université de Djelfa, qui m'ont fait l'honneur d'examiner et d'évaluer mon travail.

Résumé :

L'un des facteurs qui limite l'efficacité des cellules solaires est leur incapacité à absorber les photons de faible énergie. Parmi les nouvelles approches pour réduire ces pertes et améliorer l'efficacité, on utilise ce qu'on appelle les MQW Multiple Quantum Wells à l'intérieur de la région intrinsèque d'une cellule solaire p-i-n de semiconducteur à énergie de bande interdite plus large (barrière).

Dans ce travail, nous avons développé un programme de simulation dans MATLAB, afin de déterminer : l'effet de l'introduction de puits quantiques dans la région intrinsèque de la cellule solaire, les hauteurs (via la fraction molaire Al) et les largeurs des puits, ainsi que des technologies (dopage de l'émetteur et de collecteur) sur les paramètres de caractéristiques électriques, les paramètres externes de la cellule et la réponse spectrale.

Après notre simulation, on a obtenu des résultats comme suivant : l'insertion des puits de GaAs améliore le rendement de conversion d'une part, et l'extension du spectre d'absorption vers les basses énergies tout en améliorant la réponse spectrale de la cellule conventionnelle d'autre part. Quand comparant 30 couches de AlGaAs / GaAs multiple puits quantiques cellule solaire avec cellules solaires p-i-n. Le courant de court-circuit dans les résultats de la simulation augmente de $6,65 \text{ mA / cm}^2$ à $13,91 \text{ mA / cm}^2$. De plus, la limite la bande d'absorption de l'énergie inférieure s'étend de 700 nm jusqu'à 850 nm. On a constaté qu'un effet considérable sur les la cellule a été obtenue avec la variation de la profondeur et de la largeur des puits, des hauteurs et des largeurs de barrière et de la vitesse de recombinaison de l'interface barrière-puits. Les densités de dopage, cependant pour les régions émetteur et de collecteur ont un léger effet. Pour minimiser les pertes par réflexion et améliorer les performances des cellules solaires, nous ajoutons une couche antireflet de ZnS, qui augmente le rendement quantique considérablement.

Finalement, la cellule optimisée a atteint un rendement de conversion de 32% avec une densité de courant de court-circuit de $33,84 \text{ mA / cm}^2$ et une tension de circuit ouvert de 1,08 V.

Mots-clés : Cellule solaire, Puits quantiques, Efficacité de conversion, p-i(MQW)-n.

Abstract:

One of the limiting factors of solar cell efficiency is the inability of the letter to absorb photons with low energy than the gap. Among the new approaches to reduce such losses and to enhance the efficiency is using what are called Multiple Quantum Wells MQWs inside the intrinsic region of a p-i-n solar cell of wider band-gap energy (barrier) semiconductor. In this work, we have developed a simulation program in MATLAB, to determine the effect of introduction of quantum wells in the intrinsic region of p-i-n solar cell, the heights (via the Al molar fraction) and widths of the wells, and technological (doping for the emitter and collector layers) on the electrical characteristics parameters, external parameters of the cell and spectral response. After our simulation, we obtained results as follows: the insertion of the GaAs wells improves the conversion efficiency on the one hand, and the extension of the absorption spectrum towards the low energies while improving the spectral response of the conventional cell on the other hand. When comparing 30-layers of AlGaAs/GaAs multiple quantum well solar cell which p-i-n solar cell. The short circuit current in simulation results increases from 6.65 mA/cm^2 to 13.91 mA/cm^2 . Also, the limit of the absorption band of the lower energy extends from 700 nm to 850 nm. It has been found that a considerable effect on the outputs of the cell has been obtained with the variation of the depth and the width of the wells, the barrier heights and widths, and the barrier-well interface recombination velocity. The doping densities however for the emitter and collector layers have slight effect. To minimize reflection losses and improve the performance of solar cells, we add an anti-reflective layer of ZnS, which increases the quantum efficiency considerably.

Finally, the optimized cell reached a conversion efficiency of 32% with a short circuit current density of 33.84 mA/cm^2 and an open circuit voltage of 1.08 V.

Keys words: Solar cells, Quantum well, Conversion efficiency, p-i(MQW)-n.

ملخص:

أحد العوامل التي تحد من كفاءة الخلايا الشمسية هو عدم قدرتها على امتصاص الفوتونات ذات الطاقة المنخفضة من الفجوة. من بين الأساليب الجديدة للحد من هذه الخسائر ولتعزيز الكفاءة، استخدام ما يسمى متعددة الابار الكمونية MQW داخل المنطقة الداخلية لخلية شمسية p-i-n لأشباه الموصلات ذات طاقة فجوة أوسع (الحواجز).

Résumé

في هذا العمل، قمنا بتطوير برنامج محاكاة في MATLAB، لتحديد تأثير: إدخال الآبار الكمومية في المنطقة الجوهريّة، ارتفاع الآبار الكمومية (عبر الكسر المولي) وعرضها، والعوامل التكنولوجية (التطعيم في منطقتي الباعث والقاعدة) على الخصائص الكهربائية، الوسائط الخارجية للخلية والاستجابة الطيفية.

بعد المحاكاة، حصلنا على النتائج على النحو التالي: إدخال الآبار الكمومية يحسن كفاءة التحويل من ناحية، ويمدد طيف الامتصاص نحو طاقات منخفضة مع تحسين الاستجابة الطيفية للخلية التقليدية من ناحية أخرى. فعند مقارنة 30 طبقة من AlGaAs / GaAs لخلية شمسية ذات ابار كمومية مع خلية شمسية p-i-n. يزداد تيار الدائرة القصيرة في نتائج المحاكاة من 6.65 مللي أمبير / سم² إلى 13.91 مللي أمبير / سم². وأيضاً، يتمدد نطاق امتصاص الطاقة من اقل 700 nm إلى 850 nm.

لقد وجدنا أيضاً تأثير كبير على الوسائط الخارجية للخلية مع تباين العمق وعرض الآبار، وارتفاع وعرض الحواجز، وسرعة إعادة الالتحام السطحي، لكن لتطعيم طبقتي الباعث والقاعدة تأثير طفيف. ولتقليل خسائر انعكاس الضوء نضيف طبقة ضد الانعكاس من مادة ZnS، مما يؤدي إلى زيادة الكفاءة إلى حد كبير. أخيراً، وصلت كفاءة تحويل الخلية المحسّنة إلى 32% مع كثافة تيار للدائرة القصيرة 33.84 مللي أمبير / سم² وجهد كهربائي للدائرة المفتوحة 1.08 فولت.

مفاتيح كلمات: الخلايا الشمسية، بئر الكم، كفاءة التحويل, p-i(MQW)-n .

Table des matières

Remerciement

Introduction générale1

Chapitre I : Les cellules photovoltaïques5

I.1 Introduction5

I.2 Histoire du photovoltaïque5

I.3 Le rayonnement solaire7

I.3.1 Le soleil.....7

I.3.2 Spectre solaire.....9

I.3.3 L'air masse.....10

I.3.4 Le rayonnement direct et le rayonnement global.....12

I.4 Interaction matière rayonnement12

I.4.1 Absorption12

I.4.2 Génération-Recombinaison14

I.4.2.1 Recombinaison radiative14

I.4.2.2 Recombinaison Auger15

I.4.2.3 Recombination Shockley Read Hall (SRH).....16

I.4.2.4 Durée de vie volumique17

I.4.2.5 Recombinaison en surface.....17

I.5 Principe de fonctionnement d'une cellule solaire18

I.5.1 Cellules solaires à structure p/n18

I.5.2 Phénomènes de pertes et limitation du rendement PV20

I.5.3 Cellules solaires à structure p-i-n.....21

I.5.4 Cellule solaire a multi-puits quantique p-i(MQW)-n22

I.6	Caractéristiques (J-V) d'une cellule solaire	24
I.6.1	Le modèle de calcul de la cellule PIN	24
I.6.2	Caractéristiques (J-V) d'une cellule solaire à multi-puits quantique.....	25
I.6.2.1	La densité de courant de court-circuit	27
I.6.2.2	La tension de circuit-ouvert	27
I.6.2.3	La puissance maximale	28
I.6.2.4	Le facteur de forme	28
I.6.2.5	Le rendement de conversion de puissance	28
I.7	Efficacité quantique	29
Chapitre II	Propriétés des matériaux utilisés.....	31
II.1	Introduction	31
II.2	Définition des semi-conducteurs III-V	31
II.3	Propriétés du composé GaAs et de l'alliage AlGaAs.....	31
II.3.1	Structure cristallographique.....	31
II.3.2	Propriétés électroniques.....	33
II.4	Discontinuité de bandes aux hétérojonctions "offset" ΔEC	39
II.4.1	Puits quantiques de type I.....	39
II.4.2	Puits quantiques de type II	39
II.4.3	Puits quantiques de type III	39
II.5	Ingénierie énergétique : effets de taille quantique.....	40
II.5.1	Principe.....	40
II.6	Les hétéro structures.....	42
II.6.1	Structure à multi-puits quantiques.....	42
II.6.1.1	Description.....	42
II.6.1.2	Puits quantiques	44
La densité d'état		47
II.6.2	Super-réseaux de puits quantiques	49

Les effets excitonique	50
II.6.2.1 Propriétés optiques.....	52
II.7 L'épitaxie par Jets moléculaires pour l'hétéro structures III-V.....	54
Chapitre III : Modèle semi-analytique du transport électronique dans les cellules solaires à puits quantiques.....	56
III.1 Introduction	56
III.2 Le semi-conducteur	56
III.2.1 Le semiconducteur à l'équilibre thermodynamique	56
III.2.1.1 Semi-conducteur intrinsèque.....	58
III.2.1.2 Semi-conducteur extrinsèque	59
III.2.2 Semi-conducteur hors équilibre.....	60
III.2.2.1 Courants dans le semi-conducteur	60
III.3 Homojonction	62
III.4 Hétérojonction	63
III.4.1 Photo-courant	65
III.4.2 Courant d'éclairement pour une lumière monochromatique dans une cellule solaire à puits quantique (MQW) :.....	67
III.4.2.1 Courant dans la région quasi-neutre P.....	68
III.4.2.2 Courant dans la région quasi-neutre N	70
III.4.2.3 Courant dans la région de charge d'espace	72
III.4.2.4 Photo-courant total	72
III.5 Facteurs influents sur les performances de la cellule solaire :.....	72
III.5.1 Passivation des faces avant et arrière de la cellule	72
III.5.2 Couche antireflet :.....	73
III.5.3 Modélisation et simulation de coefficient d'absorption.....	76
III.6 Méthodes numériques	78
III.6.1 Méthode des Différences Finis (MDF)	79

Table des matières

III.6.2 Méthode des Eléments Finis (MEF)	79
III.6.3 Méthode des Volumes Finis (MVF)	80
III.7 Méthodes numériques de discrétisation	80
III.7.1 Méthode des Volumes Finis dans le cas unidimensionnel.....	81
III.7.1.1 Formulation unidimensionnelle de l'équation de Poisson.....	81
III.7.1.2 Résolution des équations algébrique	83
III.7.1.3 Formulation unidimensionnelle de l'équation de Schrödinger par la MVF .	84
III.7.1.4 Résolution de l'équation de Schrödinger	85
III.7.2 Résolution analytique et numérique de l'équation de continuité :.....	86
III.7.2.1 Densités de courant des porteurs minoritaires (photo courant généré) :	86
III.7.2.1.1 Equation de continuité des électrons dans la région P	86
III.7.2.1.2 Expression de l'équation de continuité dans la région P $0 \leq z \leq z_p$.	86
III.7.2.1.3 Equation de continuité, sa résolution et densité de courant des trous dans la région N $z_p + z_i \leq z < H$	87
III.7.2.1.4 Résolution de l'équation de continuité par la méthode du volume finis (numérique) :	88
III.8 Algorithme de Couplage.....	91
III.9 Conclusion	93
Chapitre IV : Résultats et discussions	94
IV.1 Introduction	94
IV.2 Structure de la cellule solaire.....	94
IV. 3 Modélisation de la cellule solaire	98
IV.4 Étude quantique	100
IV.4.1 Fonctions d'ondes	100
IV.4.2 États électroniques et les fonctions d'onde dans un puits quantique :	101
IV.4.3 Coefficient d'absorption	101
IV.4.4 Efficacité quantique d'une cellule solaire G951	102

Table des matières

IV.5 Comparaison entre la cellule solaire à homojonction p-i (conventionnelle)-n et celle à hétérojonction p-i(MQW)-n.....	104
IV.6 Effet de la fraction molaire sur la cellule solaire QT468B.....	106
IV.7 Influence de la couche antireflet sur la cellule solaire G951 :.....	108
IV. 8 Effet de la fraction molaire d'Al _x Ga _{1-x} As dans les barrières sur la cellule solaire G951-ARC.....	111
IV.9 Effet du nombre des puits quantiques sur la cellule solaire G951-ARC.....	117
IV.10 Effet de la température sur la cellule solaire G951-ARC.....	120
IV.11 Effet de largeur de la barrière sur la cellule solaire G951-ARC.....	123
IV.12 Effet de la largeur des puits sur la cellule solaire G951-ARC.....	125
IV.13 Effet de la concentration du dopage sur la cellule solaire G951-ARC.....	128
IV.14 Effet du taux de recombinaison superficielle vs sur la cellule solaire G951-ARC.....	131
IV.15 Cellule solaire à multi puits quantiques modulée.....	133
IV.16 Conclusion.....	134
Conclusion générale.....	135
Références.....	137
Productions Scientifiques de l'auteur.....	146

*Introduction
générale*

Introduction générale :

L'électricité est d'abord un vecteur de développement. Avec plus de 22GWh produits en 2011, l'électricité représente environ 18% de la consommation finale d'énergie dans le monde [1], elle peut être produite à partir de toutes les énergies primaires. Cependant, 68% de l'électricité produite en 2011 l'est essentiellement à partir de la combustion de ressources fossiles comme le charbon ou le gaz naturel, ce qui représente une source importante d'émission de gaz à effet de serre. Depuis les années 1970, le développement du nucléaire a certes permis d'apporter une solution pour décarboner la production d'électricité mais l'uranium, tout comme les ressources fossiles, n'est pas en quantité illimitée sur terre. Seules les énergies dites renouvelables sont des solutions pérennes. Ces dernières sont aussi très diversifiées ; on peut citer l'hydraulique, l'éolien, l'énergie des houles et des marées, la biomasse, la géothermie, ou encore la solaire thermodynamique à concentration et le solaire photovoltaïque [2]. La cellule solaire est l'élément de base d'un panneau photovoltaïque. C'est elle qui convertit l'énergie lumineuse des photons en énergie électrique par effet photoélectrique.

Les dispositifs classiques sont généralement constitués d'un matériau semiconducteur, comme le silicium, qui absorbe les photons de la lumière incidente (absorbeur ou base). Un semiconducteur est constitué d'une bande de valence et d'une bande de conduction, dans lesquelles circulent les porteurs de charges, respectivement positives (les trous) et négatives (les électrons). On définit alors la bande interdite E_G (ou gap) par la différence d'énergie entre le haut de la bande de valence E_V et le bas de la bande de conduction E_C . Lorsque l'énergie des photons incidents $h\nu$ est supérieure à la bande interdite E_G du semiconducteur, un électron de la bande de valence est excité dans la bande de conduction, ce qui crée un trou : on dit qu'il y a photogénération de paires électron-trou. En conséquence, la concentration de porteurs dans les bandes d'énergie augmente. L'énergie absorbée en excès par rapport à E_G est perdue sous forme de chaleur par désexcitation des porteurs : c'est le processus de thermalisation. Ces porteurs photogénérés doivent ensuite se déplacer vers les contacts et être collectés, afin de générer un courant dans le circuit électrique connecté ; vu de l'extérieur de la cellule, les électrons proviennent du pôle négatif (n) et les trous du pôle positif (p). Pour réaliser cette séparation des porteurs, il est nécessaire que la structure du matériau soit dissymétrique. Il faut faire en sorte que les électrons (respectivement les trous) souhaitant circuler vers le côté p (respectivement le côté n) rencontrent une barrière. Concrètement, c'est un champ électrique au sein du matériau ou des interfaces, orienté de la zone n vers la zone p qui permet d'orienter

le mouvement des porteurs. Par, exemple, on peut créer un tel champ électrique en réalisant une jonction p/n par dopage de la surface du semiconducteur, ou en réalisant une hétérojonction en associant deux matériaux de natures et de types différents [3-4].

On quantifie le rendement d'une cellule par le rapport entre la puissance débitée et la puissance lumineuse incidente. Un certain nombre de pertes, d'origines optiques ou électriques, peuvent limiter la tension délivrée ou le courant débité par la cellule [4]. Les rendements sont alors d'autant plus élevés que :

1. les processus de photo génération sont nombreux et les pertes par thermalisation sont faibles,
2. la séparation et la collecte des porteurs sont facilitées.

Le travail des technologues, ingénieurs et chercheurs qui conçoivent et fabriquent les cellules consiste alors à optimiser chacun de ces points. Donnons quelques exemples :

- Pour maximiser la photogénération, il est nécessaire de réduire les pertes optiques dues à l'ombrage en optimisant la largeur des contacts métalliques ; il faut également limiter les pertes dues à la réflexion des photons en adaptant les épaisseurs et les indices optiques des matériaux.
- Pour maximiser la collecte des porteurs, il est important de générer un champ électrique suffisant, en optimisant la structure de bandes et le dopage des matériaux ; mais il est également essentiel de réduire les pertes électriques dues aux recombinaisons des électrons avec les trous pendant leur transport. Pour cela, il faut maximiser la durée de vie des porteurs, en optimisant la qualité des matériaux et des interfaces, et ajuster les épaisseurs en conséquence.
- Pour augmenter les rendements, on peut aussi combiner des matériaux de gaps différents afin d'utiliser au mieux l'ensemble du spectre solaire et ainsi limiter les pertes par thermalisation.

L'Imperial Collège London a frôlé le record du monde pour le rendement des cellules solaires à simple jonction. Le professeur Keith Barnham, du laboratoire de photovoltaïque quantique, a annoncé avoir obtenu un rendement de 27% alors que le record du monde est de 27,6% [5-7]. La cellule solaire de l'université londonienne est une jonction simple avec 50 puits quantiques de InGaAs (Arseniure de Gallium et d'Indium) entre des barrières de GaAsP (Phospho-Arseniure de Gallium) qui permet au système d'avoir un faible « bandgap ». De plus

le spectre d'absorption est particulièrement large, pour une seule jonction il s'étend de 300 à 1000 nm. Les puits quantiques sont réalisés par des couches superposées de matériaux aux propriétés différentes qui permettent de fixer un niveau d'énergie potentielle bien précis. Comme une bille dans un creux, l'électron ou le trou se retrouve confiné dans le puits et ne pourra en ressortir qu'avec un apport d'énergie. Son énergie se retrouve discrétisée, cela signifie que la particule ne peut pas avoir n'importe quelle énergie mais prend des énergies bien précises qui dépendent des paramètres du puits. Ainsi la particule va transiter d'une couche à l'autre de la cellule solaire comme en montant ou descendant une échelle. Le rendement de la cellule se retrouve donc accrue car la particule se déplacera plus facilement et se recombinera plus difficilement. Un autre paramètre prépondérant est la qualité du réseau cristallin du matériel : plus le cristal est pure et moins les trous ou les électrons se recombineront. L'InGaAs et le GaAsP forment un cristal stable et de bonne qualité, souligne le professeur Barnham. Pourquoi ce record, pour la simple jonction, vieux de 15 ans, n'a-t-il pas été approché depuis si longtemps ? Les cellules solaires multicouches sont sûrement la réponse. Une plus grande durée de vie et des rendements supérieurs à 30%, les multicouches se sont imposées dans le spatial et sont aujourd'hui utilisées sur la majorité des satellites. Après la découverte de cette cellule, l'étude des QWSC attire l'intérêt de monde entier de la recherche. Dans cette thèse, nous sommes intéressées à la modélisation et simulation d'une cellule solaire à multi puits quantique à base de GaAs/AlGaAs.

Cette thèse est divisée en quatre chapitres. Le premier chapitre comporte quelques notions sur le fonctionnement de la cellule solaire, la forme et les normes du spectre solaire utilisé, la modélisation des cellules ainsi que les caractéristiques électriques définissant le comportement de la cellule sous l'irradiation et dans l'obscurité.

Dans le deuxième chapitre, nous présenterons une étude sur les matériaux semi-conducteurs III-V, ainsi que des généralités sur les hétérojonctions, les hétérostructures et les puits quantiques.

Dans le troisième chapitre, on rappelle des notions générales sur les semi-conducteurs. Ensuite, on expose la théorie de la jonction PN (structure de base de la cellule solaire) à l'équilibre, sous obscurité et sous éclairage avec ses différentes équations. Les caractéristiques $J(V)$ obtenues permettent, par conséquent, de définir les quatre paramètres de la cellule. On conclut ce chapitre par l'étude des différentes pertes limitant la conversion photovoltaïque.

Dans ce chapitre, l'essentiel de ce chapitre sera consacré à la résolution numérique des équations de Poisson, Schrödinger et de continuité dans les trois régions du dispositif PIN, en aboutissant aux expressions des densités de courant des porteurs minoritaires. Enfin, nous calculerons la densité de courant de pouvoir déduire la photocourant total.

Enfin nous présentons au dernier chapitre les résultats obtenus dans cette étude et leurs interprétations, qui représente par modélisation et simulation de deux différentes structures de cellule solaire ; les cellules solaire pin au $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ et les cellules solaires à puits quantique respectivement, afin de voir l'effet de l'introduction des puits quantiques GaAs sur les paramètres caractéristiques et l'efficacité quantique d'une cellule solaire au $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. En plus, on étudie l'effet des variations géométriques (largeur et profondeur des puits) et technologiques (dopage de l'émetteur et de la base) de la cellule afin d'obtenir le meilleur rendement possible. Pour chaque simulation, les caractéristiques J-V, le rendement quantique QE (Quantum Efficiency), et les paramètres caractéristiques importants d'une cellule solaire sont présentés et discutés.

Chapitre I : les cellules photovoltaïques

I.1 Introduction

On rappelle dans ce chapitre l'historique de l'effet photovoltaïque ainsi que le rayonnement solaire qui présente par le soleil, le spectre solaire et l'air masse. Ensuite, on représente le fonctionnement des cellules solaires qui basé sur la physique des semiconducteur, le phénomène d'absorption et de génération de porteurs ainsi que le mécanisme de recombinaison des porteurs de charges. Enfin, on expose la théorie de la jonction p/n, p-i-n et p-i(MQW)-n à l'équilibre, sous obscurité et sous éclairage avec ses différentes équations. Les caractéristiques (J-V) obtenues permettent, par conséquent, de définir les quatre paramètres de la cellule que sont le courant de court-circuit (I_{cc}), la tension de circuit ouvert (V_{co}), le facteur de forme (FF) , le rendement de conversion(η) et l'efficacité quantique (EQ).

I.2 Histoire du photovoltaïque

Le terme photovoltaïque provient de « photo » qui signifie lumière, et de « voltaïque » qui signifie électricité, désignant donc la production d'électricité à partir de lumière. La principale source lumineuse inépuisable étant le soleil.

- ✓ L'effet photovoltaïque a été découvert par le physicien français Edmond Becquerel (1788-1878) en 1839. Il plaçait deux électrodes enrobées de platine dans un récipient avec un électrolyte et a déterminé un courant circulant entre elles (Figure I-1-a), Becquerel a constaté que l'intensité du courant a changé lorsqu'il est exposé à la lumière. Il s'agissait de l'effet photovoltaïque externe [8],
- ✓ En 1873, l'ingénieur britannique Willoughby Smith et son assistant Joseph May ont découvert que le semi-conducteur sélénium a changé sa résistance lorsqu'il est exposé à la lumière. Il s'agissait de l'effet photovoltaïque interne, dans lequel les électrons sont arrachés par la lumière et devenus donc des porteurs de charge libres dans le semi-conducteur [8],
- ✓ Trois années plus tard, les anglais William Adams et Richard Day ont découvert qu'une tige de sélénium munie d'électrodes de platine peut produire de l'énergie électrique lorsqu'elle est exposée à la lumière (Figure I-1-b). Il a été prouvé pour la première fois qu'un corps solide peut directement convertir l'énergie lumineuse en énergie électrique

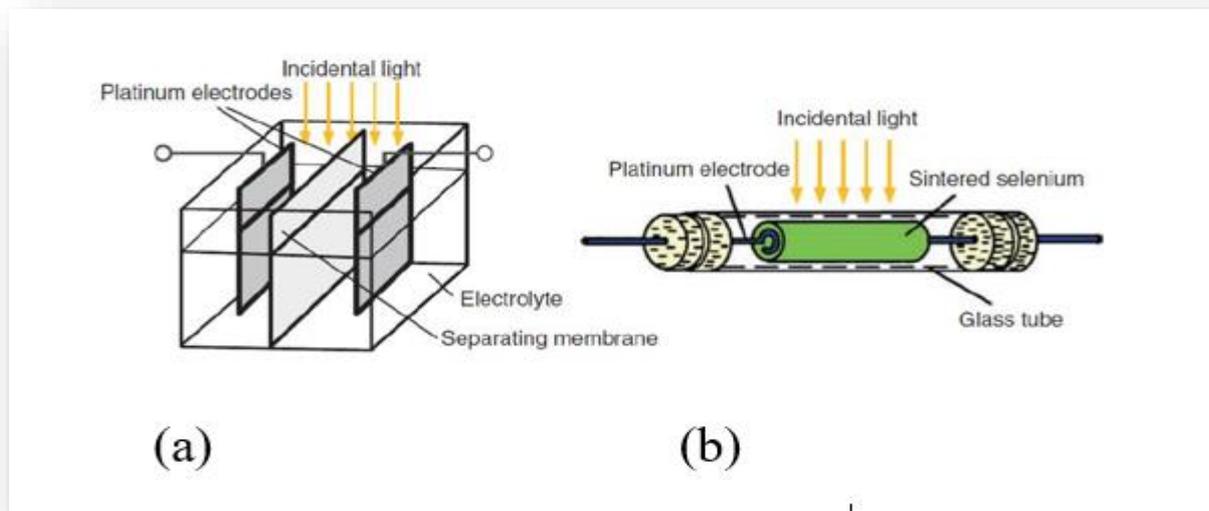


Figure I.1 : Les débuts du photovoltaïque : (a) expérience électrochimique de A.E. Becquerel, (b) la première cellule solaire d'Adams et Day [8]

- ✓ En 1883, l'inventeur américain Charles Fritts construit un petit "Module" de cellules de sélénium en les couvrant avec une très mince électrode d'or, d'une superficie d'environ 30 cm^2 en obtenant un rendement de conversion d'environ 1% [8].
- ✓ En 1905, Albert Einstein explique l'effet photo électronique et reçoit pour cela le Prix Nobel de physique 1921.
- ✓ 1918, Jan Czochralski découvre le procédé du même nom permettant de produire des cristaux monocristallins de dimensions importantes. Cette technologie est largement utilisée pour l'informatique, ainsi que dans les cellules en silicium monocristallin.
- ✓ En 1949, William B. Shockley (1910–1989) a établi la théorie de la jonction PN [9] et a lancé les bases théoriques des cellules solaires utilisées aujourd'hui,
- ✓ Le 25 Avril 1954, les laboratoires Bell annoncent la première cellule solaire en silicium d'intérêt pratique, d'une surface 2 cm^2 et d'une efficacité 6% [10],
- ✓ Ce rendement a atteint les 10 % dans les années qui ont suivi, mais avec des prix élevés du module solaire (le prix par Watt était environ 1000 fois plus que le prix d'aujourd'hui) donc ils étaient utilisés uniquement pour des applications spéciales,
- ✓ Le 17 Mars 1958, Vanguard (satellite artificiel américain) est le premier satellite utilisant l'énergie solaire, avec un panneau de 100 cm^2 et 0.1W [8] ;

- ✓ Dans les années 1960, le développement en photovoltaïque était très avancé en utilisant des nouveaux matériaux semi-conducteurs comme l'arséniure de gallium (GaAs). Depuis cette date, une recherche intensive a été dirigée vers les différentes méthodes et les matériaux utilisés, dans le but d'augmenter le rendement de la cellule.

La figure I.2 présente l'évolution des performances photovoltaïques obtenues avec l'ensemble des filières photovoltaïques actuelles, qu'elles soient matures comme dans le cas du silicium cristallin, des composés III-V, des couches minces à base de CIGS, de CdTe, ou de Si amorphe ou émergentes comme dans le cas des filières organiques ou hybrides. On peut remarquer que le rendement de conversion record atteint plus de 40 % pour les filières multi-jonctions basées sur le GaAs, et entre 20 et 25 % pour les filières à simple jonction (Si cristallin, CIS), tandis que les filières émergentes organiques atteignent 7-8 % actuellement [11].

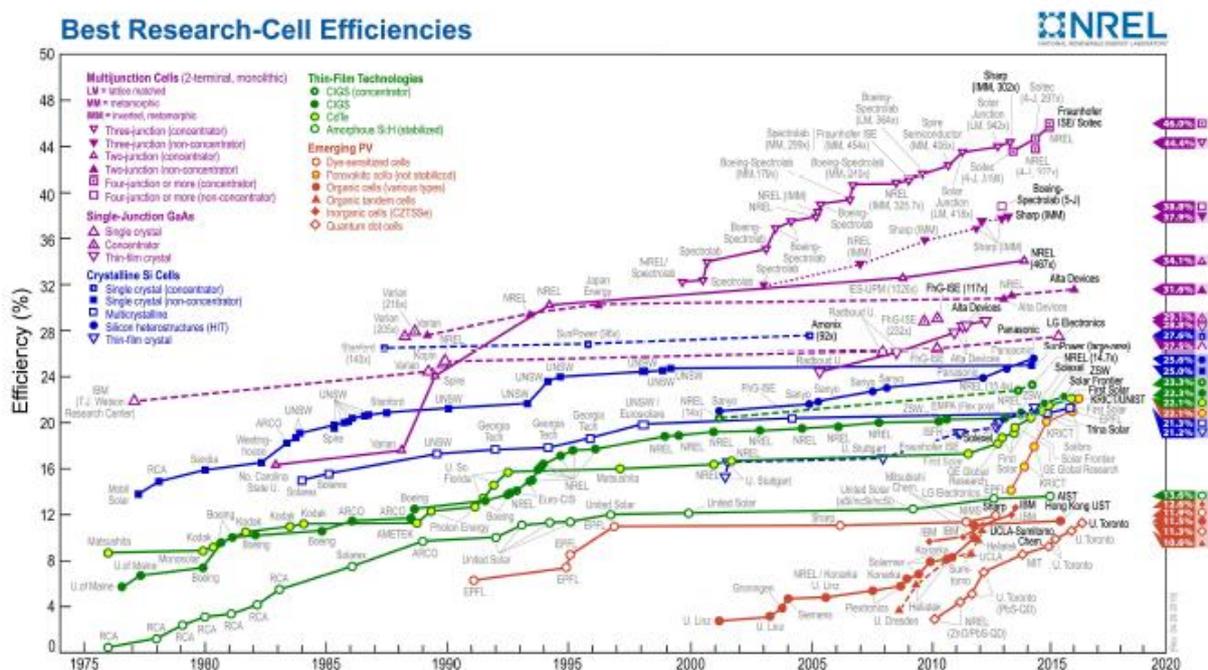


Figure I.2 : L'état de l'art des rendements record [12].

I.3 Le rayonnement solaire

I.3.1 Le soleil

L'énergie solaire est propre et renouvelable. La Terre reçoit sous forme de lumière du Soleil plus de 10 000 fois l'énergie que l'humanité consomme. En effet, la surface du globe reçoit

annuellement de l'énergie solaire ayant une puissance allant de 85 à 290 W/m² [13]. Et cette énergie est inépuisable car elle est entretenue par les réactions nucléaires qui ont lieu dans le soleil.

Le soleil est l'étoile la plus proche de la terre ; 150 millions de km, il est principalement composé de 70 % d'hydrogène et de 28 % d'hélium. La fusion thermonucléaire dans son centre libère une énergie énorme sous forme de rayonnements. Le plasma qui le constitue est en majeure partie opaque à la lumière sauf les zones superficielles qui sont transparentes. Le soleil tourne sur lui-même environ 27 jours. Sa masse est 33×10^4 fois plus élevée que celle de la terre, et son volume plus d'un million de fois supérieur à celui de notre planète. Sa température à la surface ; la photosphère, avoisine les 6000 °C et monte à 15 millions de degrés au centre, là où se déroulent est réglée par un cycle d'environ 11 ans d'un maximum au suivant, lié aux variations de son les réactions de fusion thermonucléaire et où naissent les photons. L'activité solaire champ magnétique ; 104 fois plus puissant que celui de la terre [13].

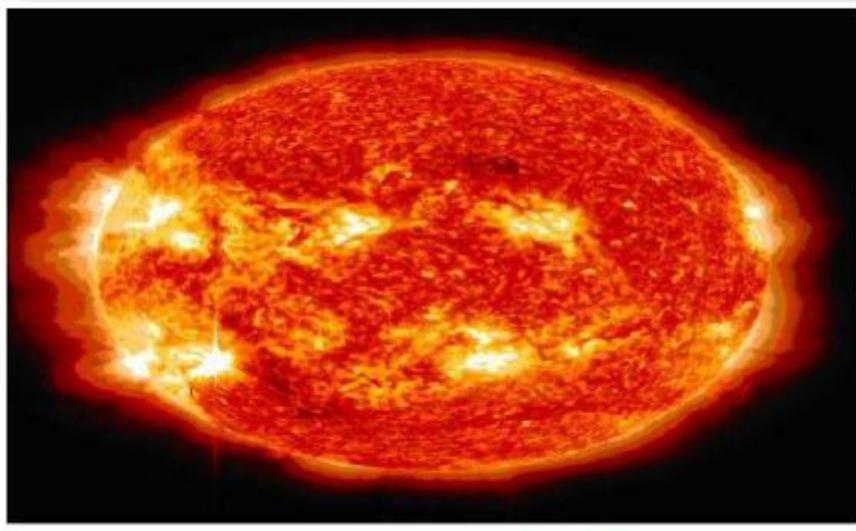


Figure I.3 : Le soleil [14]

L'énergie radiative provient du soleil est à cause des réactions de fusion nucléaire au cœur de cette étoile. A chaque seconde une énorme quantité de masse (6.1011Kg) de l'hydrogène (H₂) est convertie en Hélium (He), avec une perte de masse nette environ de 4.103 Kg, ce qui est équivalent à 4.1020 Joule d'après la relation d'Einstein ($E = mc^2$). Cette énergie est émise principalement en tant que rayonnement électromagnétique dans une large gamme s'étalent de l'ultraviolet à l'infrarouge et même dans les ondes radio [15].

I.3.2 Spectre solaire

Jusqu'au début du XXe siècle, la lumière était considérée seulement comme une onde électromagnétique. Mais certains phénomènes n'ont pas été expliqués dans le cadre de cette théorie ondulatoire, comme l'effet photoélectrique par exemple. En 1900 Planck a proposé une nouvelle approche attestant que la lumière est composée des paquets d'énergie, appelés ultérieurement photons par Einstein, où chaque paquet d'énergie est lié à une longueur d'onde par la relation [16] :

$$E_{\text{photon}} = h \cdot \nu = \frac{h \cdot c}{\lambda} \quad (\text{I. 1})$$

Où h est la constante de Planck ($\approx 6,626 \cdot 10^{-34} \text{J} \cdot \text{s}$), c est la vitesse de la lumière ($\approx 2,998 \cdot 10^8 \text{m/s}$), et λ est la longueur d'onde [m]. Ensuite, De Broglie a introduit la notion conciliante de la dualité de la lumière ou elle peut être considérée à la fois comme des corpuscules (paquets d'énergie) et comme une onde électromagnétique, ou les deux aspects sont liés par :

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (\text{I. 2})$$

Où p est la quantité du mouvement d'un corpuscule. Dans le domaine du PV, on s'intéresse au deuxième aspect, qui atteste que la lumière se propage sous forme de paquets d'énergie appelés photons. La Figure I.4 montre l'intensité de la lumière émise par le soleil en fonction de la longueur d'onde, que l'on appelle l'irradiance du spectre solaire [16].

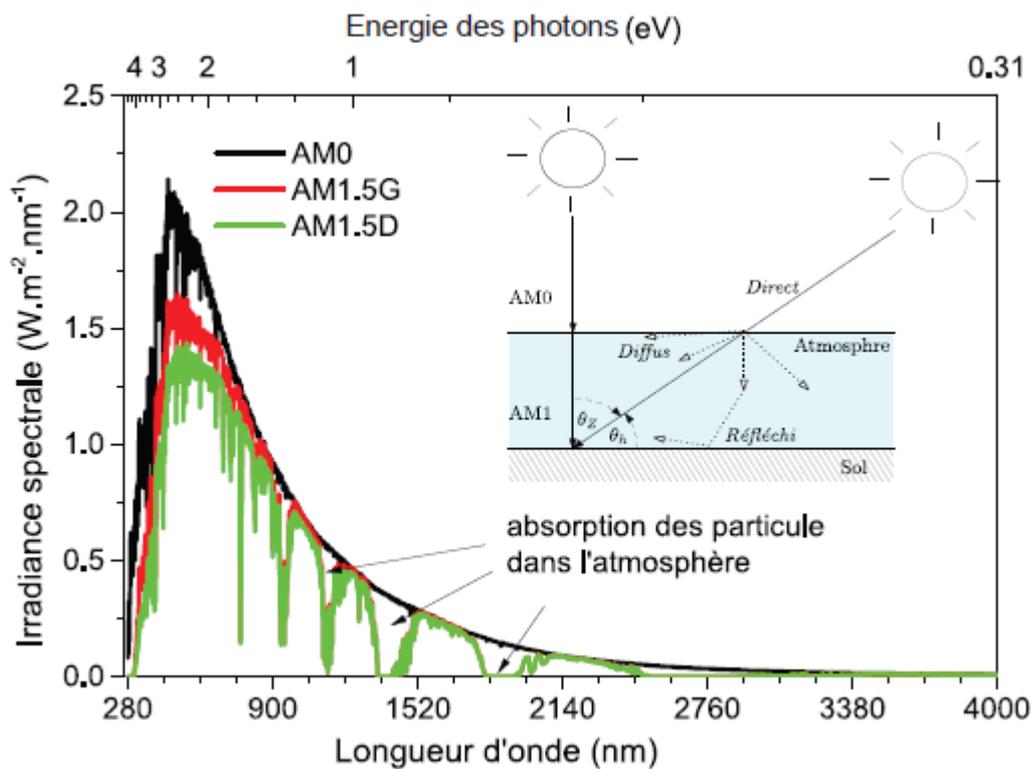


Figure 1.4 : Le spectre solaire AM0, AM1.5G (Global) et AM1.5D (Direct), obtenus par le standard ASTM G173-03 à 37° [17].

Dans son parcours au cours de la journée et au cours de l'année, les rayons du soleil traversent plusieurs couches de l'atmosphère, ce qui modifie l'irradiance spectrale solaire suivant la position dans le globe. Ceci est estimé par la masse d'air traversée.

I.3.3 L'air masse

L'intensité lumineuse issue du soleil normalement incidente sur la surface de la Terre est appelée la constante solaire. Cette constante est approximativement d'une valeur de $1,4 \text{ kW/m}^2$ au-dessus de la couche atmosphérique et est réduite sur Terre à 1 kW/m^2 par réflexion et absorption des particules présentes dans la couche atmosphérique. Cette perte est appelée la « masse d'air » (AM). La désignation AM0 correspond à une masse d'air nulle pour la lumière arrivant au-dessus de notre atmosphère à incidence normale. Le titre AM1 correspond lui à une même lumière arrivant à la surface terrestre. L'appellation AM1.5 désigne la masse d'air rencontrée pour la lumière arrivant à $48,2^{\circ}$ sur la surface de la Terre, soit une lumière plus faible du fait que l'épaisseur de la couche atmosphérique traversée est plus grande (figure I-5).

De manière générale, l'indice m associée à la masse d'air (AM m) est calculé comme suit $AM = 1 / \sin(\theta)$. θ étant l'angle entre l'incidence des rayons lumineux et l'horizontale à la terre [18].

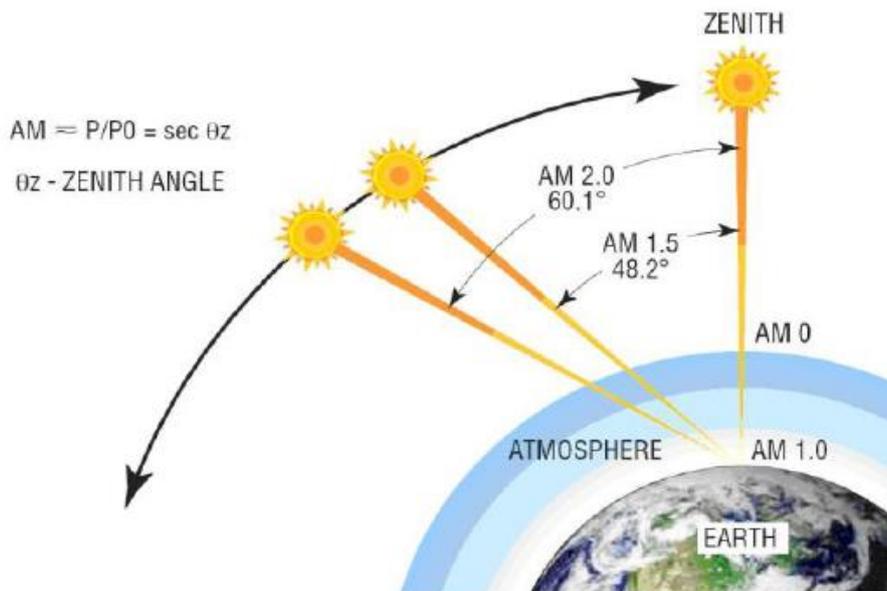


Figure I.5 : Nombre d'air-masse [19].

Hors atmosphère, il est nul et on l'appelle AM0 (Air masse zéro). Lorsque le soleil se trouve au zénith ($\theta=0$), c'est AM1 (Air masse 1).

Dans le domaine photovoltaïque, pour comparer les performances de différentes cellules solaires, on utilise l'air masse 1.5 (AM1.5) correspondant à ($\theta=48.20^\circ$). Pour une pression atmosphérique p (mb) différente des conditions normales et pour une altitude z (km) différente de l'épaisseur de l'atmosphère (épaisseur réduite de 7.8 km), le nombre d'air masse est corrigé par la relation suivante :

$$AM = \frac{1}{\cos \theta} \times \frac{p}{1013} \exp - \frac{z}{7.8} \tag{I.3}$$

AM une autre relation plus récente [20], définit le nombre d'air masse comme :

$$AM \approx \{[\cos \theta + 0.48353\theta^{0.095846} / (96.741 - \theta)^{1.754}]^{-1}\} \times \frac{p}{1013} \tag{I.4}$$

I.3.4 Le rayonnement direct et le rayonnement global

Le rayonnement solaire global (noté G) qui arrive au sol a deux composantes : le rayonnement direct (noté D) et le rayonnement diffus. Ce dernier n'a pas d'orientation privilégiée, il provient de toute la voute céleste et il est surtout riche en couleur bleue.

Le rayonnement direct AM1.5D de 900 W/m^2 et le rayonnement global AM1.5 G de 1000 W/m^2 adopté comme spectre de référence sont présentés dans la figure (I-4).

Ces rayonnements sont développés par ASTM (American Society for Testing and Materials) avec le programme SMARTS (Simple Model of the Atmospheric radiative Transfer of Sunshine) [21-22]. Le spectre de référence ASTM G173 modelé et développé avec SMARTS suppose les hypothèses suivantes :

- ✓ Ciel clair sans nuages,
- ✓ $AM_0=1367 \text{ W/m}^2$,
- ✓ Inclinaison de surface tournée vers le soleil = 37° (par exemple, d'un collecteur solaire monté au sol),
- ✓ Température $288.1 \text{ }^\circ\text{K}$,
- ✓ Pression atmosphérique 1013.25 mbar ,
- ✓ Altitude au sol = 0 km ,
- ✓ Humidité relative 46.04% ,
- ✓ Hauteur d'eau condensable 1.416 cm ,
- ✓ Hauteur réduite d'ozone= 0.3438 atm-cm ,
- ✓ Modèle d'aérosol rural avec une profondeur optique d'aérosol (en anglais : Aerosol Optical Depth AOD)= 0.084 à $\lambda= 500 \text{ nm}$,
- ✓ Rapport de mélange volumétrique de $\text{CO}_2=370 \text{ ppm}$,

Albédo spectral basé sur un «sol sableux léger» avec une réflexion non lambertienne et un demi-angle d'ouverture de pyrhéliomètre = 2.9° (pour calculer le rayonnement circumsolaire).

I.4 Interaction matière rayonnement

I.4.1 Absorption

Le fonctionnement d'une cellule solaire photovoltaïque est basé sur l'absorption des photons suffisante pour pouvoir induire d'un électron depuis un état occupé de la bande de valence vers

un état libre de la bande de conduction. En réalité, cette transition se fait de différentes manières selon le gap du semi-conducteur [23].

✚ Semi-conducteurs à gap direct et indirect :

Le courant produit par la cellule solaire est généré à travers les transitions optiques entre les bandes d'énergie du semi-conducteur. Ce dernier peut être caractérisé selon son gap, à savoir, semi-conducteurs à gap direct ou semi-conducteurs à gap indirect. Dans le semi-conducteur à gap direct, les électrons et les trous possèdent le même vecteur d'onde k , le maximum d'énergie de la bande de valence et aligné avec le minimum d'énergie de la bande de conduction. Par contre, dans un semi-conducteur à gap indirect, le maximum d'énergie de la bande de valence et le minimum d'énergie de la bande de conduction sont décalés, leurs vecteurs d'onde sont donc différents. La figure (I.6) explique ce concept.

L'absorption optique dans les semi-conducteurs à gap indirect est considérablement plus faible que dans les semi-conducteurs à gap direct. Néanmoins, la durée de vie des porteurs majoritaires y est plus élevée. Typiquement, dans les semi-conducteurs à gap direct, la durée de vie des électrons et des trous ne dépasse pas 10^{-8} s, alors que dans un semi-conducteur à gap indirect la durée de vie des porteurs libres peut être 1000 fois plus grande [24].

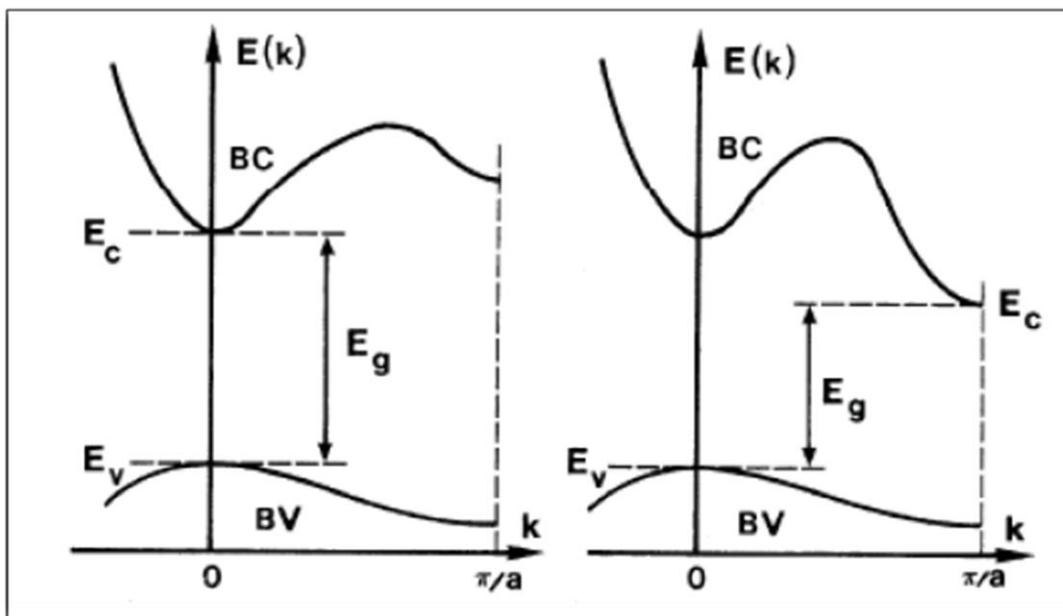


Figure I.6 : Courbes de dispersion. a) Electrons dans un semiconducteur à gap direct. b) Electrons dans un semiconducteur à gap indirect.

I.4.2 Génération-Recombinaison

La génération est la création de porteurs dans le semi-conducteur, elle est caractérisée par un paramètre (G) qui mesure le nombre de porteurs créés par unité de volume et par unité de temps ($\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$). Elle peut être due à l'agitation thermique ou à l'excitation du semi-conducteur par une source extérieure (optique, électrique, etc...). La recombinaison est le processus inverse. Elle est caractérisée par un paramètre (R) ($\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$) propre au matériau. Le temps (τ) qui sépare la recombinaison d'une paire électron-trou de sa génération est appelé la durée de vie de ces porteurs de charge. Les trois principaux mécanismes qui limitent la durée de vie des porteurs de charge en volume dans un matériau semi-conducteur sont :

- Recombinaison radiative,
- Recombinaison Auger,
- Recombinaison SRH (Shockley-Read-Hall).

I.4.2.1 Recombinaison radiative

Ce genre de recombinaison a principalement lieu dans les semi-conducteurs à gap direct comme l'arséniure de gallium (GaAs) (Figure I-7-a). Le taux de recombinaison est donné par la relation suivante :

$$R_{rad} = B(np - n_i^2) \quad (\text{I} - 5)$$

B est une constante de proportionnalité [111].

Pour les deux types de semi-conducteur (type p et type n respectivement) et en régime de faible injection où la densité des porteurs majoritaires reste inchangée et seule la densité des porteurs minoritaires est affectée, les taux de recombinaison se réduisent aux expressions suivantes:

- ✓ Pour un semi-conducteur de type p :

$$R_{rad,p} = \frac{\Delta n}{\tau_{rad,p}} \quad (\text{I} - 6) \quad \tau_{rad,p} = \frac{1}{Bp_0} \quad (\text{I} - 7)$$

- ✓ Pour un semi-conducteur de type n :

$$R_{rad,p} = \frac{\Delta p}{\tau_{rad,p}} \quad (I-8)$$

$$\tau_{rad,p} = \frac{1}{Bn_0} \quad (I-9)$$

$\tau_{rad,n}, \tau_{rad,p}$ sont les durées de vie des porteurs minoritaires.

n_0 et p_0 sont respectivement, les concentrations d'électrons et de trous à l'équilibre.

n, p sont respectivement, les concentrations d'électrons et de trous hors équilibre.

I.4.2.2 Recombinaison Auger

La recombinaison Auger est une recombinaison faisant intervenir trois particules. Lorsqu'un électron (ou un trou) quitte la bande de conduction (ou de valence) pour se recombiner avec un trou (ou un électron) de la bande de valence (ou de conduction), l'énergie est transférée à un tiers porteur (électron ou trou) qui se thermalise ensuite par l'intermédiaire d'un phonon (Figure I-7-b). Ce type de recombinaison se produit surtout dans les régions fortement dopées. Le taux de recombinaison est alors donné par [111] :

$$R_{Auger} = (A_n n + A_p p)(np - n_i^2) \quad (I-10)$$

A_n et A_p sont les coefficients Auger pour les électrons et les trous.

Les durées de vie des porteurs minoritaires en régime de faible injection (low injection : li) et en régime de forte injection (high injection : hi) sont données par les relations suivantes :

✓ Pour un semi-conducteur de type p :

$$\tau_{Auger,n,li} = \frac{1}{A_p p_0^2} \quad (I-11)$$

$$\tau_{Auger,n,hi} = \frac{1}{(A_n + A_p)\Delta n^2} \quad (I-12)$$

✓ Pour un semi-conducteur de type n :

$$\tau_{Auger,p,li} = \frac{1}{A_n n_0^2} \quad (I-13)$$

$$\tau_{Auger,p,hi} = \frac{1}{(A_n + A_p)\Delta p^2} \quad (I-14)$$

Ces expressions montrent que la recombinaison Auger est proportionnelle à l'inverse de la densité de porteurs au carré ($\tau \sim 1/n^2$), la dépendance avec le niveau d'injection de τ_{Auger} sera plus forte que τ_{rad} , comme dans le cas par exemple de l'émetteur fortement dopé.

I.4.2.3 Recombination Shockley Read Hall (SRH)

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 [25-26]. 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 (Figure II-7-c). 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. On écrit alors le taux de recombinaison SRH :

$$R_{SRH} = \frac{C_n C_p N_R (np - n_i^2)}{C_n (n + n_i e^{-(E_i - E_R)/kT}) + C_p (p + n_i e^{(E_i - E_R)/kT})} \quad (I - 15)$$

N_R est la concentration des centres recombinants d'énergie E_R ; E_i est le niveau d'énergie intrinsèque ; C_n et C_p sont les probabilités de capture des électrons et des trous. La durée de vie SRH des porteurs est donnée par la relation :

$$\tau_{SRH} = \frac{\tau_{n_0} (p_0 + p_1 + \Delta n) + \tau_{p_0} (n_0 + n_1 + \Delta n)}{n_0 + p_0 + \Delta n} \quad (I - 16)$$

Où, n_0 et p_0 sont respectivement, les concentrations d'électrons et de trous à l'équilibre, n_1 et p_1 sont des facteurs statistiques définis par les équations suivantes :

$$n_1 = N_c \exp \frac{E_R - E_c}{k_B T} \quad (I - 17) \quad p_1 = N_v \exp \frac{E_v - E_R}{k_B T} \quad (I - 18)$$

τ_{p_0} est la durée de vie des trous lorsque les centres pièges sont complètement occupés, τ_{n_0} est la durée de vie des électrons lorsque les centres pièges sont complètement vides, elles sont données par les relations suivantes :

$$\tau_{p_0} = \frac{1}{\sigma_p v_{th} N_R} \quad (I - 19) \quad \tau_{n_0} = \frac{1}{\sigma_n v_{th} N_R} \quad (I - 20)$$

Où σ_n et σ_p sont les sections efficaces de capture des électrons et des trous du centre recombinant concerné, la v_{th} vitesse thermique des porteurs donnée par :

$$v_{th} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m^*}} \quad (I - 21)$$

I.4.2.4 Durée de vie volumique

Le taux de recombinaison des porteurs minoritaires dans le volume R_{vol} est donné par la somme des contributions de chaque taux de recombinaison vu précédemment :

$$R_{vol} = R_{Rad} + R_{Auger} + R_{SRH} \quad (I - 22)$$

En conséquence, la durée de vie volumique est donnée par la relation suivante :

$$\frac{1}{\tau_{vol}} = \frac{1}{\tau_{Rad}} + \frac{1}{\tau_{Auger}} + \frac{1}{\tau_{SRH}} \quad (I - 23)$$

I.4.2.5 Recombinaison en surface

La recombinaison des porteurs en excès se produit non seulement dans le volume du cristal, mais aussi à sa surface (Figure I-7-d). Cette dernière est perturbée à cause des traitements mécaniques et chimiques qu'elle subit. La recombinaison au niveau de la surface est plus importante que celle du volume donnant naissance à un courant de diffusion néfaste. Elle est définie par les relations suivantes [111]:

❖ Pour un semi-conducteur de type n :

$$D_p \frac{\delta \Delta p}{\delta z} (z = 0) = R_{n,sur} = S_p \Delta p \quad (I - 24)$$

❖ Pour un semi-conducteur de type p :

$$D_n \frac{\delta \Delta n}{\delta z} (z = 0) = R_{p,sur} = S_n \Delta n \quad (I - 25)$$

R_{sur} est le taux de recombinaison en surface. S_n et S_p sont respectivement les vitesses de recombinaison en surface des électrons et des trous.

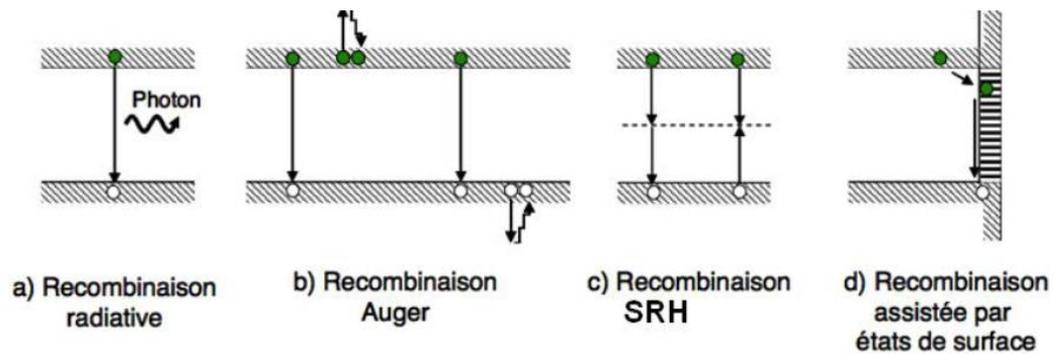


Figure I.7 : Représentation des différents mécanismes de recombinaison.

I.5 Principe de fonctionnement d'une cellule solaire

I.5.1 Cellules solaires à structure p/n

La transformation de l'énergie solaire en énergie électrique par effet photovoltaïque repose sur la succession des trois processus suivants :

- ✓ L'absorption des photons (création des paires électron-trou) par le matériau actif de la cellule solaire. Ce dernier doit donc présenter deux niveaux d'énergies ce qui explique l'intérêt des semiconducteurs dans l'industrie photovoltaïque.
- ✓ La séparation des charges photogénérées (excitons). Elle nécessite l'application d'un champ électrique permettant la dissociation de l'électron et du trou. Ce champ peut être obtenu de différente manière, soit par le biais d'une hétérojonction ou d'une diode Schottky, mais plus généralement via la création d'une jonction p/n. Nous nous intéresserons plus particulièrement à cette dernière.
- ✓ La diffusion des porteurs jusqu'au niveau des contacts électriques où ils pourront être collectés. Pour cela, le matériau actif de la cellule doit être suffisamment conducteur pour autoriser le transport des charges. De plus, la nature des contacts entre les électrodes de collecte et le matériau actif doit être connue et maîtrisée.

Un schéma représentatif du principe de fonctionnement d'une jonction p/n est proposé ci-dessous :

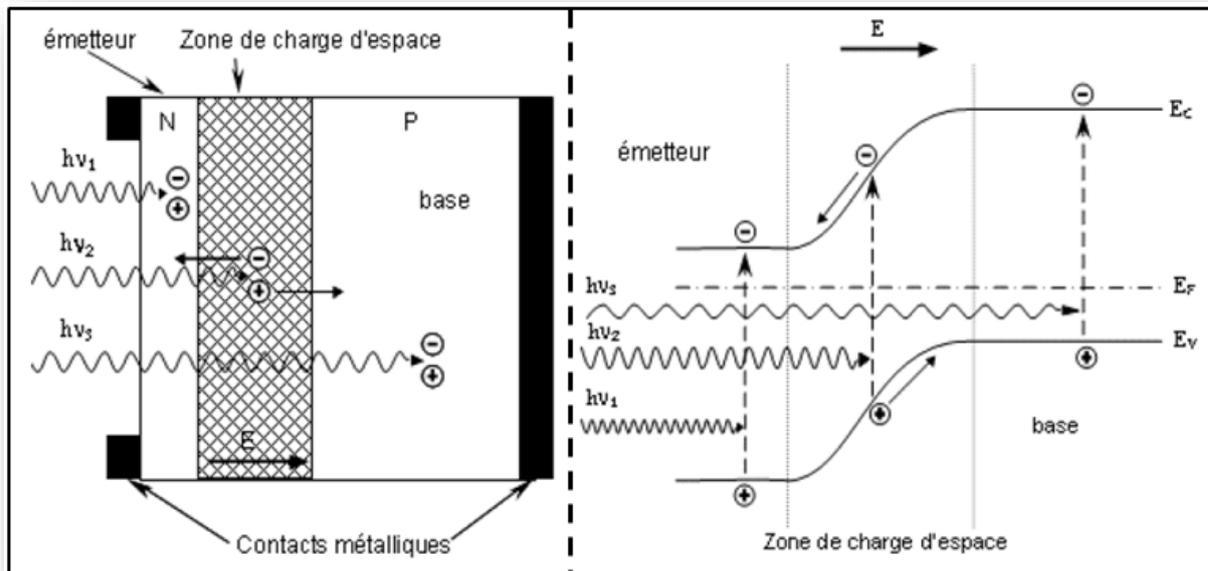


Figure I.8 : Schéma d'un dispositif photovoltaïque constitué d'une jonction PN (à gauche), et structure de bandes associée (à droite). Tirée de [27].

La jonction pn est l'élément principal d'un dispositif photovoltaïque. Elle est constituée d'une couche de matériaux actif dopée type n (i.e. présentant un excès d'électrons), et d'une couche dopée type P (i.e. présentant un excès de trous). Par analogie avec la microélectronique la zone n est souvent appelée émetteur, tandis que la zone p est appelée base.

La mise en contact de ces deux couches entraîne l'apparition d'un courant de diffusion dû à la différence entre les niveaux de Fermi des deux couches dopées à l'inverse. En conséquence, les porteurs majoritaires (électrons dans la zone n, trous dans la zone p) vont migrer vers la zone où ils sont minoritaires (zone p pour les électrons, zone n pour les trous) et se recombiner avec leur alter-ego. De part et d'autre de l'interface pn, des charges fixes non compensées, provenant des impuretés dopantes ionisées, apparaissent et forment petit à petit une zone appelée « zone de charge d'espace » (ZCE). La ZCE, ou encore zone de déplétion, possède une largeur qui dépend principalement de la concentration en dopants et de leur mobilité dans le matériau considéré. Par ailleurs, elle s'étend préférentiellement dans la zone la moins dopées et dont les porteurs ont la mobilité la plus faible. Dans une jonction pn de silicium par exemple, la ZCE fait quelques centaines de nanomètres et s'étend plus en profondeur dans la zone type p. A l'intérieur de la ZCE les charges fixes contribuent à l'établissement d'un champ électrique qui s'oppose à la diffusion des porteurs. L'équilibre thermodynamique est atteint lorsque la force

électrique compense la force motrice de diffusion. Dans le même temps, les niveaux de Fermi des deux couches s'égalisent ce qui se traduit par une courbure des bandes à l'interface.

Lorsque la jonction est placée sous illumination, on distingue deux contributions au photocourant global. Le photocourant de diffusion qui provient des excitons qui sont créés à l'extérieur de la ZCE, et le photocourant de génération qui fait référence au courant induit par la collecte des porteurs générés à l'intérieur de la ZCE.

I.5.2 Phénomènes de pertes et limitation du rendement PV

Au-delà des limitations d'ordre thermodynamique, les systèmes photovoltaïques sont le siège de différents types de pertes. Celles-ci sont récapitulées sur la figure suivante.

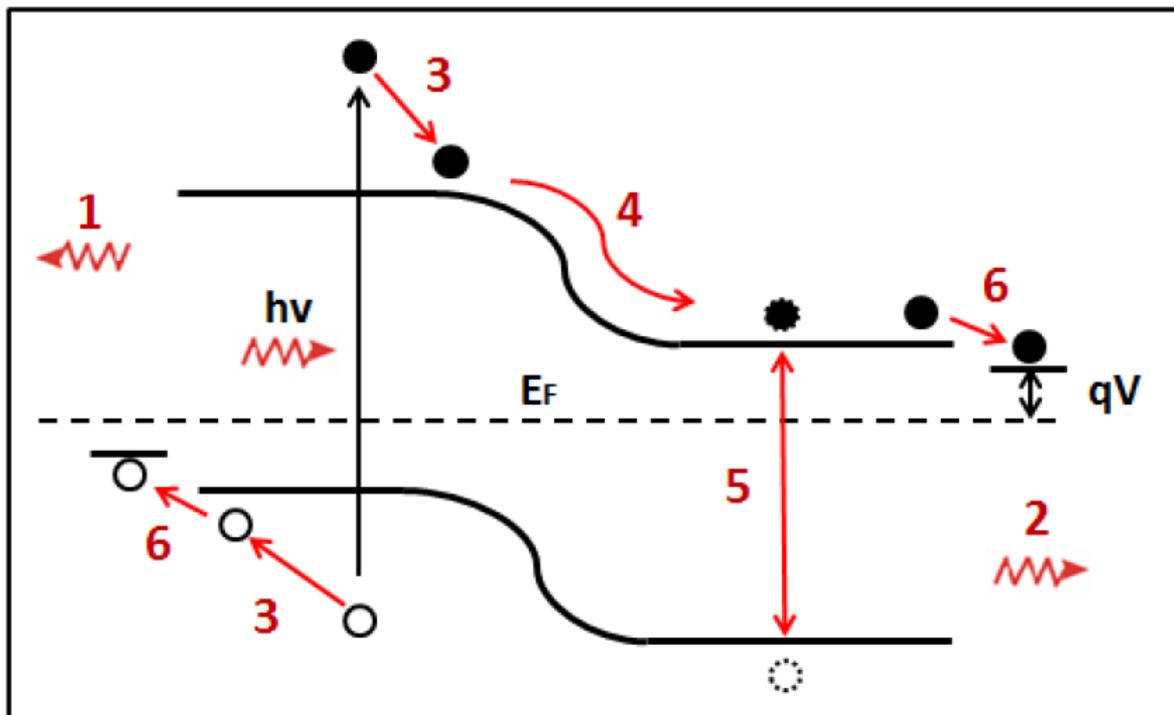


Figure I.9 : Schéma de la structure de bandes d'une jonction p/n, et mécanismes de pertes associés (de 1 à 6) [28].

Le schéma de la structure de bandes dans une jonction pn permet est particulièrement adapté pour la description des mécanismes de pertes.

(1) La réflexion des photons par la surface de la cellule est un phénomène classique.

Beaucoup de travaux ont portés sur la réduction de ce type pertes, soit en déterminant l'inclinaison optimale de la cellule en fonction de l'éclairement dans une région donnée, soit par texturation de la surface de la cellule [29].

- (2) La transmission des photons intervient lorsque ceux-ci ont une énergie inférieure au gap du matériau actif constitutif de la cellule. Les pertes occasionnées dépendent donc de la nature du matériau utilisé. Ainsi, les cellules à faibles gap souffrent moins de la transmission des photons que les cellules à grands gap.
- (3) La thermalisation des porteurs a lieu lorsque des photons d'énergie supérieure au gap sont absorbés. L'électron et le trou se désexcitent en bord de bandes (respectivement de conduction et de valence) et l'excédent d'énergie ($h\nu - E_{\text{gap}}$) est évacué sous forme de chaleur.
- (4) La courbure des bandes à l'interface p/n de la jonction engendre une diminution de l'énergie des porteurs de charges avant que ceux-ci ne puissent être collectés. On peut difficilement jouer sur ce mécanisme de pertes puisqu'il est inhérent à la conception d'une jonction p/n.
- (5) La recombinaison de l'électron et du trou est discuté plus en détail dans la précédente de ce chapitre. De manière générale, on distingue les phénomènes de recombinaisons radiatifs (comme la PL) des recombinaisons non-radiatives (Auger, défauts,...). Les pertes associées à ce mécanisme peuvent être diminuées en contrôlant précisément le niveau de pureté du matériau (en particulier lors du dopage), ainsi que l'épaisseur relative des couches p et n (et donc les caractéristiques de la ZCE).
- (6) Enfin, un dernier mécanisme de perte a lieu lors de la collecte des porteurs au niveau des contacts électriques. Celui-ci provient de la différence d'énergie entre le niveau de Fermi des contacts et la bande conduction (collecte des électrons) ou la bande de valence (collecte des trous).

Parmi tous ces mécanismes, la thermalisation des porteurs est sans doute le plus limitant puisqu'il compte à lui seul environ 30 % des pertes totales dans les systèmes photovoltaïque. De fait, les nouvelles pistes technologiques étudiées pour les cellules solaires de troisième génération visent particulièrement à réduire ce type de pertes (Cellules à porteurs chauds, « Up » et « Down » conversion, cellule tandem,...). L'ensemble de ces nouveaux concepts ne sera pas présenté ici mais est bien documenté dans la littérature [30-31].

I.5.3 Cellules solaires à structure p-i-n

Dans la cellule à structure p-i-n, on insère une couche isolante entre les deux couches semi-conductrices de type p et de type n de la jonction p-n. Ceci permet d'obtenir et de contrôler

dans la zone isolante un champ électrique de contact maximal et constant qui transforme cette zone en ZCE, ce qui permet une meilleure séparation des charges dans cette zone et leur accélération vers leurs électrodes respectives. L'avantage de ces structures P-I-N est donc l'augmentation de la zone de charge d'espace qui participe à la photogénération. Il en résulte des longueurs de diffusion plus grandes que celles à simple jonction PN. Ceci a pour objectif d'accroître le nombre de porteurs photo-crés et de réduire leurs recombinaisons au niveau de la ZCE [31].

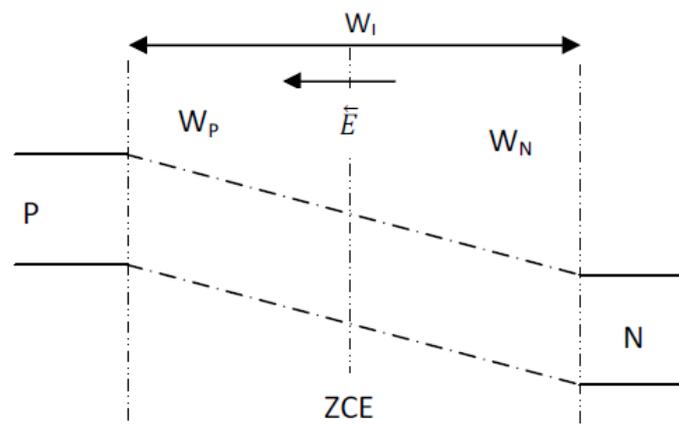


Figure I.10 : Diagramme de bande d'une cellule solaire p-i-n

Pour améliorer encore plus les performances de telle cellule p-i-n, des nanostructures ont été introduites dans la zone intrinsèque. Il s'agit de puits quantiques, de fils quantiques, ou nanotubes noyés dans la matrice des matériaux formant la couche intrinsèque. Cette amélioration est obtenue par la mise en œuvre de propriétés particulières associées à ces nanostructures : les effets quantiques et les effets de faible dimensionnalité qui renforcent considérablement les paramètres critiques de la cellule. Ces cellules sont utilisées dans des applications très spéciales [31].

I.5.4 Cellule solaire à multi-puits quantique p-i(MQW)-n

Les cellules solaires à puits quantiques QWSCs (Quantum Well Solar Cells) a généré [32] sont des hétéro structures à base de semi-conducteurs. L'installation des couches épitaxiales est effectué de façon à obtenir une fine épaisseur de matériau le plus faible gap (GaAs par exemple) entouré de part et d'autre par des matériaux de gap plus important (AlGaAs par exemple). La structure ainsi réalisée constitue un puits de potentiel pour les électrons et les

trous. Si l'épaisseur du puits est inférieure à la longueur d'onde de Broglie (17nm dans le GaAs à 300K), les niveaux énergétiques dans le puits sont quantifiés, dans le cas idéal d'un puits unidimensionnel infini, ils sont tous simplement donnés par :

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \tag{I-26}$$

Où m est masse effective de charge et L est largeur de puits.

Comme représenté sur la figure (I.11), les cellules solaires à puits quantiques QWSC sont des cellules solaires conventionnelles pin incorporées par des couches ultraminces d'un matériau semi-conducteur d'une petite bande interdite (matériau puits quantique) à l'intérieur de la zone intrinsèque, séparées par des couches d'un matériau semiconducteur d'une grande bande interdite (matériau barrière). Une telle structure permet le confinement des photo porteurs absorbés dans les puits quantiques, tout en générant un courant amélioré d'une part, et l'extension du spectre d'absorption vers les basses énergies tout en améliorant la réponse spectrale de la cellule solaire conventionnelle d'autre part. Une fois les paires électrons-trous sont photo-générées, elles sont activées thermiquement au-dessus de la barrière et sont échappées des puits et entraîné par le champ électrique interne, et sont contribuées au photocourant [32,33].

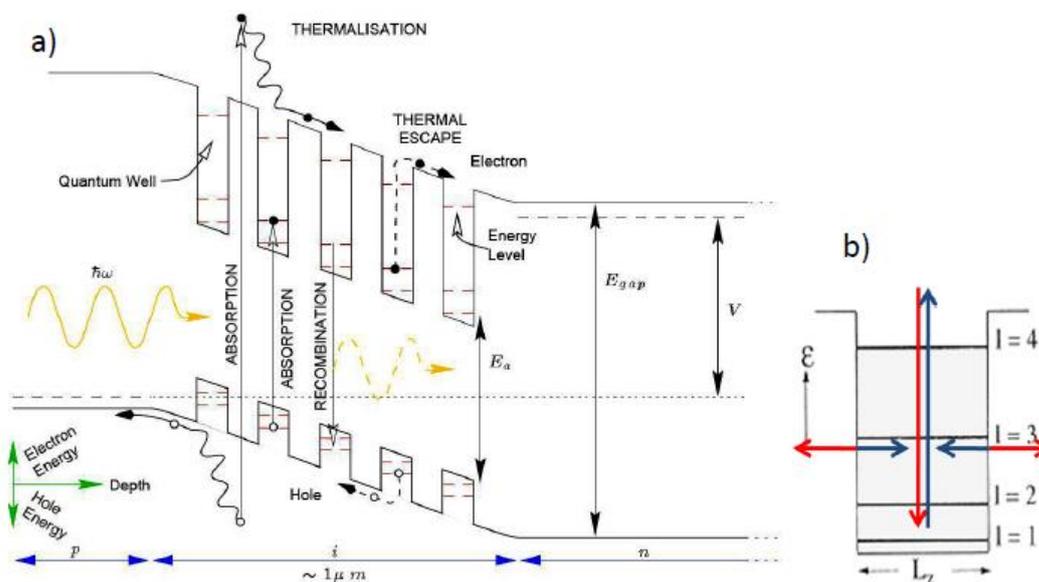
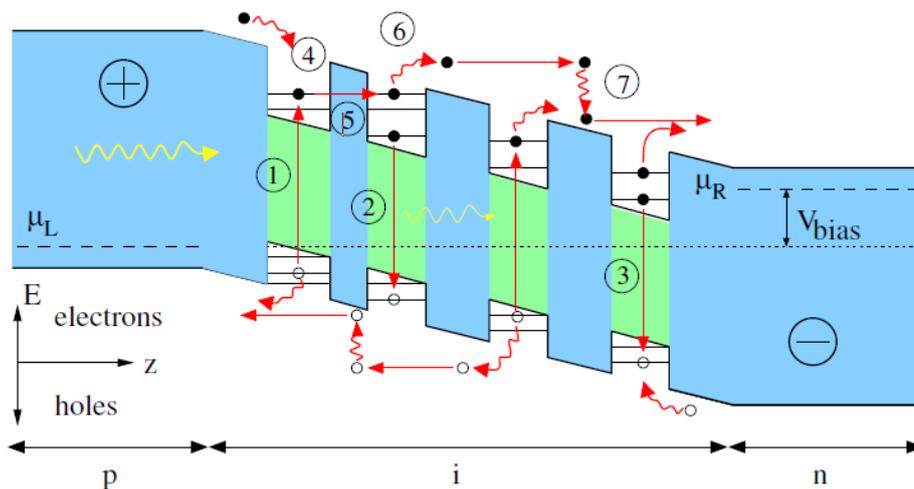


Figure I.11 : a) Diagramme de bande d'énergie de la cellule solaire p-i (MQW)-n, b) avec le détail inter sous bande énergétique des niveaux quantifiés électroniques dû à la variation de la largeur du puits [34].

On peut résumer les processus de recombinaisons, de génération et du transport dans la figure suivant :



Génération et recombinaison

Transport

- | | |
|--|--|
| <ul style="list-style-type: none"> 1. Photogénération des paires électron-trou 2. Recombinassions radiative 3. Recombinassions non radiative
(Auger, piège/SRH) | <ul style="list-style-type: none"> 4. Capture de transporteur. 5. Tunneling (effet tunnel) résonnant et non résonnant 6. Evacuation thermique et balayage par le champ construit. 7. Relaxation par diffusion inélastique
(phonons optiques) |
|--|--|

Figure I.12 : Résumé du principe de fonctionnement d’une cellule solaire p-i(MQW)-n [35].

I.6 Caractéristiques (J-V) d’une cellule solaire

I.6.1 Le modèle de calcul de la cellule PIN

La densité du courant d’une jonction PIN, selon le modèle de J. C. Rimada et L. Hernandez est donnée par la relation [36] :

$$J = J_0 \left[\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right] - J_G + J_R \tag{I-27}$$

où q est le charge d'électron, J_0 est le courant de saturation, J_G et J_R sont le courant de génération et le courant de recombinaison, respectivement. Ils sont donnés par les relations suivantes :

Le courant de génération J_G [37] :

$$J_G = qW[G_{op} + G_{th} + A_{cnr}n_i]exp\left(-\frac{qV_d}{kT}\right) \quad (I-28)$$

Le courant de recombinaison J_R :

$$J_R = qW[G_{th}]exp\left(-\frac{qV_d}{kT}\right) \quad (I-29)$$

W : la largeur de la zone intrinsèque.

G_{op} : est le courant de génération optique, G_{th} : est le courant de génération thermique.

A_{cnr} : le coefficient d'absorption non radiative.

I.6.2 Caractéristiques (J-V) d'une cellule solaire à multi-puits quantique

Les caractéristiques d'une cellule solaire de N puits quantiques chacun de longueur L_w dans la région intrinsèque de longueur W avec des bandes gap des barrières E_{gB} et band gap de puits E_{gw} a été étudié par nombreux chercheurs [36-39]. Les régions n et p sont uniformes dopées. Selon les hypothèses mentionnées ci-dessus, la relation J-V est donnée par :

$$J_{MQW} = J_0(1 + r_R\beta) \left[exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right] + (\alpha r_{NR} + J_S) \left[exp\left(\frac{qV}{2kT}\right) \right] - J_{PH} \quad (I-30)$$

$$r_R = 1 + f_W \left[\gamma_B \gamma_{DOS}^2 exp\left(\frac{\Delta E}{kT}\right) - 1 \right] \quad (I-31)$$

$$r_{NR} = 1 + f_W \left[\gamma_A \gamma_{DOS} exp\left(\frac{\Delta E}{2kT}\right) - 1 \right] \quad (I-32)$$

où r_R et r_{NR} sont les taux d'améliorations radiative et non radiative, respectivement, et l'augmentation des recombinaisons radiatives et non radiatives de la région intrinsèque due à l'insertion des puits quantiques dans cette région, f_W est une fraction du volume de la région intrinsèque remplacé par le matériau du puits quantique et $\alpha = qWA_B$ et $\beta = \frac{qWB_B n_{iB}^2}{J_0}$ sont des paramètres également définis par Anderson [40]. Le J_S est le courant de recombinaison de surface et J_{PH} est le photocourant.

Le terme J_s a été introduit pour représenter la recombinaison de l'interface de puits-barrière, qui est caractérisées par la vélocité de recombinaison :

$$J_s = 2N_W q n_{iB} \gamma_{DOS} v_s \exp\left(\frac{\Delta E}{kT}\right), \quad (I-33)$$

Où $\Delta E = E_{gB} - E_{gW}$, et $\gamma_{DOS} = g_w/g_B$ est le facteur d'amélioration de la densité d'états, avec g_w et g_B sont les densités d'états des volumes effectives du puits et de la barrière et n_{iB} est la concentration des porteurs dans la région intrinsèque.

Le photocourant est calculée à partir de l'efficacité quantique de la cellule (QE). La contribution (QE) des régions n et p a été évaluée classiquement par la résolution de l'équation du transport à température ambiante. La distribution de photogénération des porteurs dans la région intrinsèque (QE) est calculée avec l'expression suivant :

$$QE(\lambda) = [1 - R(\lambda)] \exp\left\{\left(-\sum \alpha_i z_i\right) [1 - \exp(-\alpha_B W - N\alpha_w^*)]\right\}, \quad (I-34)$$

Où $R(\lambda)$ est le spectre réflectivité de surface, le premier facteur exponentiel est dû à l'atténuation de la lumière dans les couches précédentes de la cellule. α_i et z_i sont le coefficient d'absorption et la largeur des couches précédentes, respectivement, α_B est le coefficient d'absorption dans les barrières, N est le nombre des puits et α_w^* est le coefficient non-dimensionnel du puits quantique, utilisé pour les énergies au-dessous de la band gap du barrière[41], on a calculé la densité d'états pour une seul puits quantique avec la fonction d'approximation, ou on a négligé le couplage entre les sous bandes lourd et légère de valence. Le coefficient d'absorption du puits peut être calculé comme suit :

$$\alpha_w^*(E) = \alpha_w \ell,$$

$$\alpha_w(\lambda) = \sum \alpha_{e_n-hh_m} + \sum \alpha_{e_n-lh_m}$$

Où $\sum \alpha_{e_n-hh_m}$ and $\sum \alpha_{e_n-lh_m}$ sont les coefficients d'absorption des transitions a la band de conduction des électrons-trous lourd et des électrons-trous légère, respectivement, α_w est le coefficient d'absorption du puits, E_n sont les transitions d'énergies, ℓ est l'épaisseur quantiques de l'hétéro structure et tous les autres symboles sont défini en référence [40]. Une fois que le QE total est calculé sous l'irradiation AM1.5G, le photocourant en fonction de spectre solaire est déterminé par l'intégration suivant :

$$J_{PH} = q \int F(\lambda) QE_{TOTAL}(\lambda) d\lambda \quad (I-35)$$

Et puis, l'équation (I.30) est complètement déterminé

Les principales caractéristiques d'une cellule solaire sont ensuite extraites de la courbe densité de courant/tension, notée $J(V)$ (Figure I.13), obtenue en faisant varier la tension électrique aux bornes de la cellule quand celle-ci est placée sous le simulateur solaire.

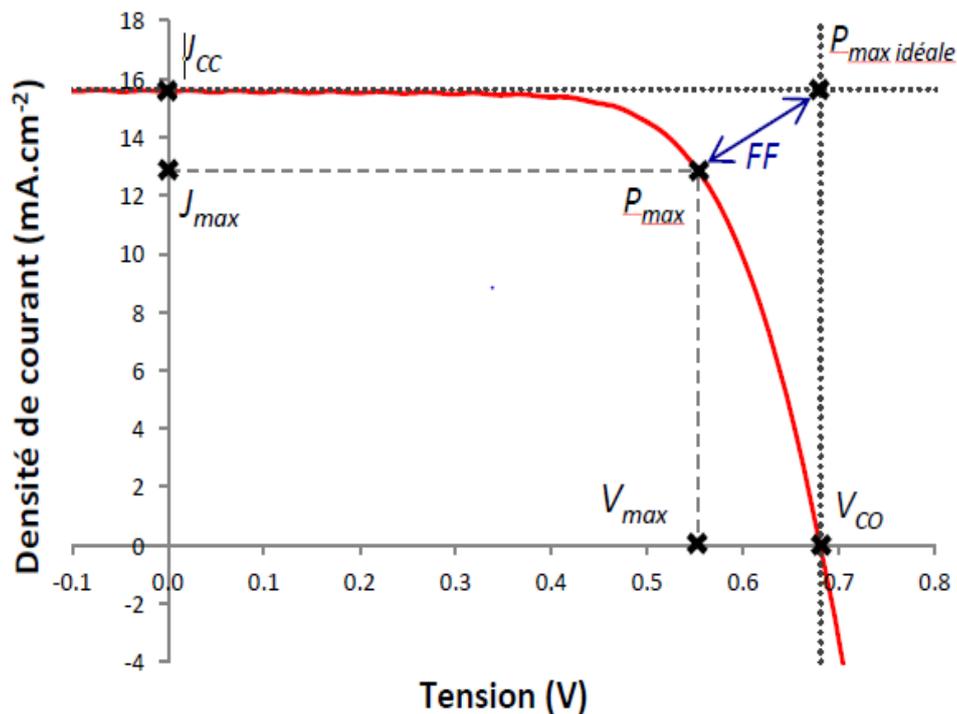


Figure I.13 : Courbe $J(V)$ d'une cellule photovoltaïque.

Cinq paramètres clés de la cellule peuvent être directement tirés de cette courbe :

I.6.2.1 La densité de courant de court-circuit

La densité de courant de court-circuit, notée J_{CC} , correspond à la valeur du courant traversant une unité de surface de la cellule lorsqu'aucune différence de potentiel n'est appliquée aux bornes de celle-ci. Ce courant, qui est le courant photogénéré dans la cellule, est proportionnel à l'intensité lumineuse, la surface éclairée, et la mobilité des porteurs de charges.

I.6.2.2 La tension de circuit-ouvert

La tension de circuit-ouvert, notée V_{CO} , correspond à la différence de potentiel mesurée aux bornes de la cellule sous éclairage lorsque celle-ci ne débite pas de courant dans le circuit

extérieur. Elle est liée à la nature des matériaux qui constituent la couche active de la cellule, mais aussi aux cinétiques de recombinaison des porteurs au sein du dispositif.

I.6.2.3 La puissance maximale

La puissance maximale de la cellule, notée P_{max} , correspond à la puissance maximale pouvant être délivrée par la cellule photovoltaïque et est le produit d'une tension notée V_{max} et d'un courant noté J_{max} [41].

$$P_{max} = V_{max} \times J_{max}$$

Graphiquement, P_{max} correspond à la surface du rectangle qui est défini à partir de l'origine du repère (0 ; 0) et du point de puissance maximale (V_{max} ; J_{max}). Tandis que la puissance maximale idéale de la cellule (P_{max} idéale) correspond graphiquement à la surface du rectangle défini à partir de l'origine du repère (0 ; 0) et du point et du point de puissance maximale idéale (V_{CO} ; J_{CC}).

I.6.2.4 Le facteur de forme

Le facteur de forme (FF), nommé aussi facteur de remplissage (Fill Factor), est le rapport entre les surfaces de puissances maximales réelle (P_{max}) et idéale (P_{max} idéale) définies précédemment et illustrées Figure I.13. Il est donc défini par la relation suivante :

$$FF = \frac{J_{max} \times V_{max}}{J_{CC} \times V_{CO}} = \frac{P_{max}}{P_{max\text{idéale}}}$$

Plus la cellule solaire montre un comportement idéal, plus les surfaces des deux rectangles sont proches, et plus la valeur du facteur de forme augmente. L'écart par rapport au cas idéal provient des résistances aux contacts, de la faible mobilité des porteurs de charges au sein du semi-conducteur, ou encore aux courants de fuite dans la cellule [42].

I.6.2.5 Le rendement de conversion de puissance

Le rendement de conversion de puissance, noté η , est défini comme le rapport entre la puissance maximale (P_{max}) délivrée par la cellule et la puissance lumineuse incidente (P_{in}), suivant la relation [42] :

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_{in}} = \frac{FF \times V_{CO} \times J_{CC}}{P_{in}}$$

Ce dernier paramètre caractéristique, rendant compte des performances globales du dispositif, est de manière générale celui qui est mis le plus en avant.

I.7 Efficacité quantique

L'efficacité quantique externe (EQE) est définie par le rapport du nombre d'électrons collectés aux contacts et du nombre de photons incidents. L'efficacité quantique interne (EQI) est calculée par rapport au nombre de photons absorbés. L'efficacité quantique est une grandeur qui permet de savoir dans quelle gamme de longueurs d'onde la cellule solaire répond le mieux. On peut ainsi en déduire des informations liées à la qualité des matériaux et des contacts [43].

$$EQE = \frac{\text{nombre des paires électron - trous collectées}}{\text{nombre des photons incidents}}$$

$$EQI = \frac{\text{nombre des paires électron - trous collectées}}{\text{nombre des photons absorbés}}$$

Tout photon incident n'est pas absorbé, certains sont réfléchis à la surface, et d'autres sont transmis sans absorption, soit parce que les photons ont une énergie inférieure au E_g , ou que l'épaisseur de la jonction n'est pas suffisante pour absorber tous les photons. En outre, les paires électron-trou créés par les photons absorbés ne sont pas toutes collectées, il y en a qui se recombinent avant d'arriver aux contacts. La Figure 1.14 montre l'EQE et EQI en fonction de la longueur d'onde, ainsi que les différentes pertes possibles indiquées pour c-Si. La qualité de la jonction est d'autant meilleure que l'efficacité quantique est proche de l'unité.

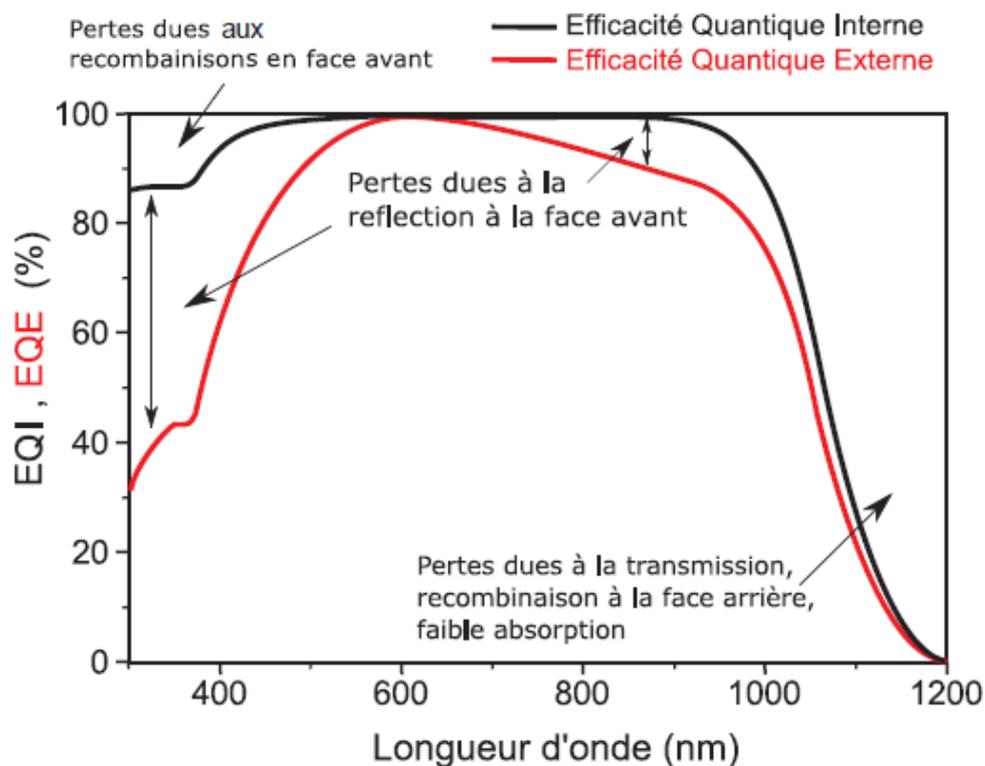


Figure I.14 : EQE et EQI pour le silicium cristallin avec une couche antireflet (ARC) [43].

La différence entre EQE et EQI est due principalement à la réflexion d'une partie de la lumière en face avant. Cette réflexion est due à la différence de l'indice de réfraction entre l'air et le matériau. Cette différence peut être atténuée par le rajout d'une ou plusieurs couches antireflet (ARC) qui accorderont l'indice de réfraction entre l'air et le matériau (figure I. 15). En outre, une surface rugueuse (texturée) permet de diminuer la réflexion [43].

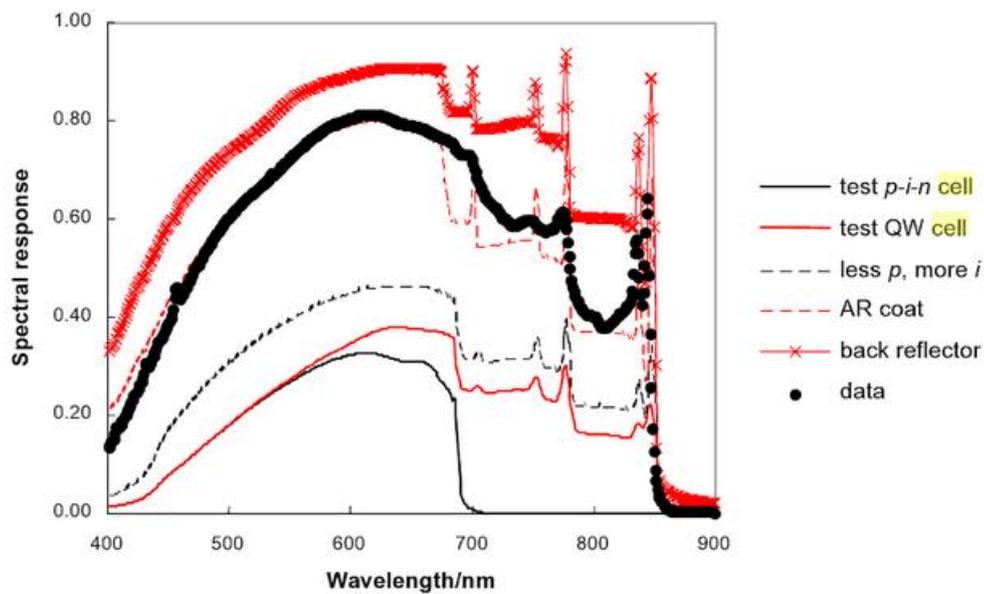


Figure I.15 : Réponse spectrale d'une cellule solaire pin avec une couche antireflet (ARC) et une couche back reflector [85].

**Chapitre II:
Propriétés des
matériaux
utilisés**

II.1 Introduction

Après les spectaculaires résultats enregistrés dans la technologie Silicium dans le domaine de la microélectronique, 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 semi-conducteurs III-V. La nature du matériau impliqué dans la réalisation des cellules solaires en couches minces est un paramètre très influent sur les propriétés électriques du dispositif.

II.2 Définition des semi-conducteurs III-V

Les semi-conducteurs III-V sont des corps composés d'un ou plusieurs éléments de la colonne III (bore, gallium, aluminium, etc.) et de la colonne V (arsenic, phosphore, antimoine, etc.) de la classification périodique de Mendeleïev, tels que l'arséniure de gallium, l'arséniure d'indium, nitrure de gallium ou des alliages ternaires tels que $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Ils représentent généralement une haute mobilité électronique et une bande interdite directe, et sont utilisés dans les applications optoélectronique (diodes laser, cellule solaire, etc)

II.3 Propriétés du composé GaAs et de l'alliage AlGaAs

II.3.1 Structure cristallographique

Le composé de l'arséniure de gallium (GaAs) ainsi que l'alliage ternaire arséniure de gallium-aluminium (AlGaAs) appartiennent aux groupes III-V. Ils cristallisent dans la structure Zinc-Blende. Cette structure s'apparente à celle du diamant (C) et il est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées identiques (C.F.C), l'un appartenant au groupe III et l'autre au groupe V. Ces deux réseaux s'interpénètrent et sont décalés l'un par rapport à l'autre du quart de la grande diagonale le long de celle-ci.

Chaque atome est l'origine de quatre liaisons orientées dans l'espace suivant les axes de symétrie d'un tétraèdre régulier, comme la montre la figure (II. 1) ainsi que la présentation de la première zone Brillouin d'un cristal Zinc Blende (figure II. 2) détaillé sur le tableau (II.1) [44-45]:

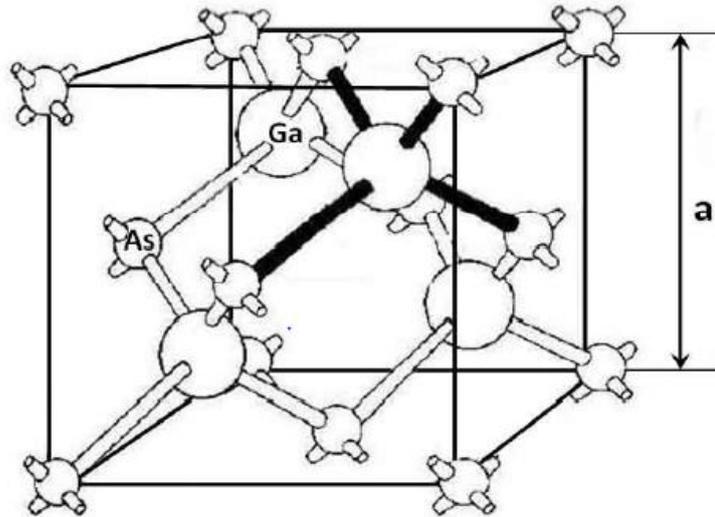


Figure II.1 : Mailles cristallographiques d'une structure Zinc Blende.

a : représente le paramètre de maille du réseau.

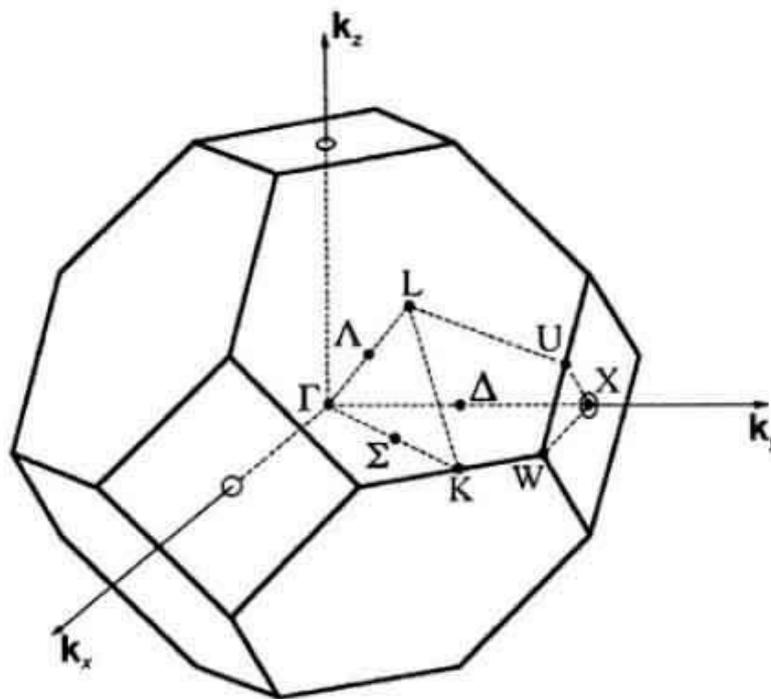


Figure II.2 : Première zone Brillouin d'un cristal Zinc Blende.

Tableau II.1 : Points et directions de la première zone Brillouin d'un cristal Zinc Blende.

Points		Directions	
Γ	Centre de zone (0, 0,0)		
X	bord de zone dans la direction 100 et les directions équivalentes ($2\pi/a, 0, 0$)	Δ	100 et les directions équivalentes
L	bord de zone dans la direction 111 et les directions équivalentes ($\pi/a, \pi/a, \pi/a$)	Λ	111 et les directions équivalentes
K	bord de zone dans la direction 110 et les directions équivalentes ($3\pi/2a, 3\pi/2a, 0$)	Σ	110 et les directions équivalentes

II.3.2 Propriétés électroniques

Le $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ est un alliage de deux composés binaires GaAs et AlAs. Les deux matériaux ont la même structure cristalline. Les paramètres physiques de ces deux matériaux sont voisins et se rejoignent pour une température de 900 °C environ, dont la concentration relative en aluminium peut varier entre $x = 0$ (GaAs) et $x = 1$ (AlAs), les atomes d'aluminium et de gallium occupant des sites équivalents dans la maille de cet alliage cristallin. Bien que le paramètre de maille de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ varie linéairement avec x , le désaccord de maille existant entre GaAs et AlAs n'exécède pas 0,15 %, ce qui permet d'obtenir un alliage de bonne qualité, l'une des raisons du succès et de la popularité du système AlGaAs/GaAs dans les applications électroniques et optoélectroniques. De plus, par la variation de la fraction molaire d'aluminium, il est possible de tirer parti des variations simultanées des propriétés électriques et optiques des matériaux (GaAs et AlAs) [46].

En particulier, la largeur de la bande interdite qui varie de 1.46 eV pour GaAs à 2.16 eV pour AlAs (figure II.3), ce qui a une incidence directe sur les phénomènes d'absorption de l'alliage réalisé.

Les propriétés physiques de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ sont obtenues par interpolation linéaire en utilisant celles de GaAs et AlAs. Par exemple, le paramètre de maille (constante du réseau cristallin) de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ peut se déduire par interpolation linéaire en utilisant les paramètres de maille de GaAs et de AlAs. Il est donné par la loi de Végard [46-47] :

$$a(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}) = x \cdot a(\text{AlAs}) + (1 - x) \cdot a(\text{GaAs}) \quad (\text{II-1})$$

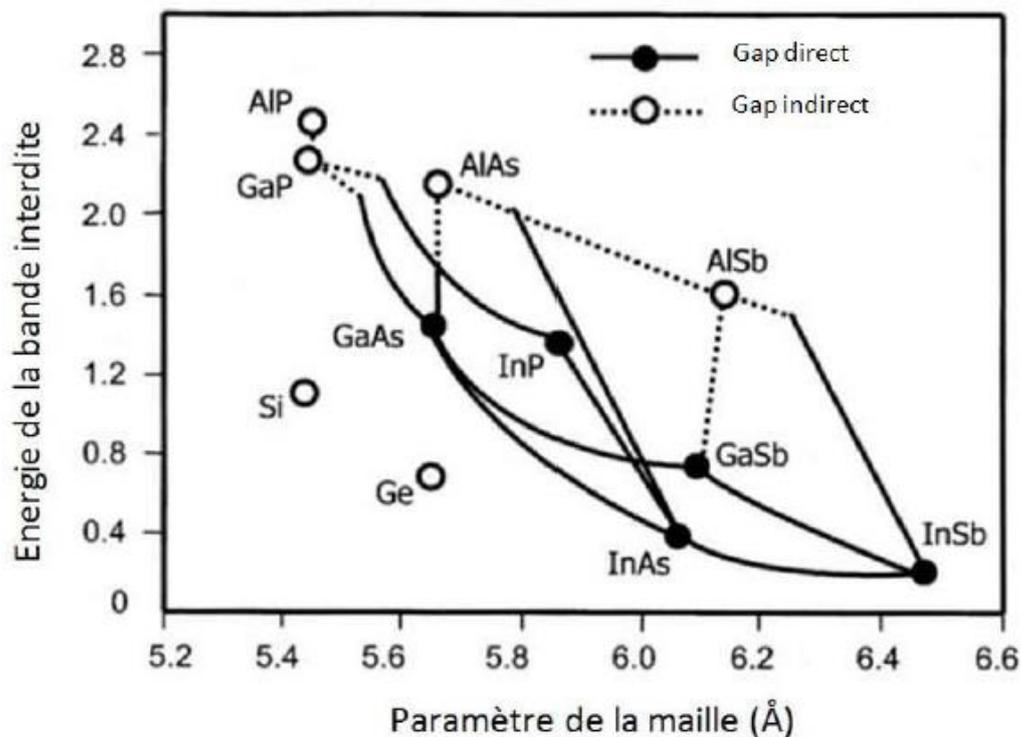


Figure II.3 : Energie de bande interdite des principaux binaires et ternaires III-V en fonction de leur paramètre de maille [48-49].

L'énergie de bande interdite est une mesure de la quantité d'énergie nécessaire à un électron pour passer de la bande de valence à la bande de conduction sous l'impulsion d'une excitation thermique ou autre. Cette quantité est un facteur de la capacité du matériau à supporter une forte température ; elle définit la température maximale de fonctionnement des composants électriques. Donc, plus la largeur de bande est importante, plus le composant électrique peut fonctionner à haute température.

Le matériau sera appelé semiconducteur à petit gap (notée E_g), si la distance énergétique entre le bas de la bande de conduction et le sommet de la bande de valence, est inférieur à 2 eV. C'est le cas des matériaux GaAs, Ge, Si, InP. Le matériau est considéré comme un semiconducteur à grand gap pour des valeurs supérieures à 2 eV [50].

La figure (II. 4) présente le diagramme des bandes d'énergies de GaAs et AlAs. On remarque que le GaAs présente un gap direct alors qu'AlAs est à gap indirect [44].

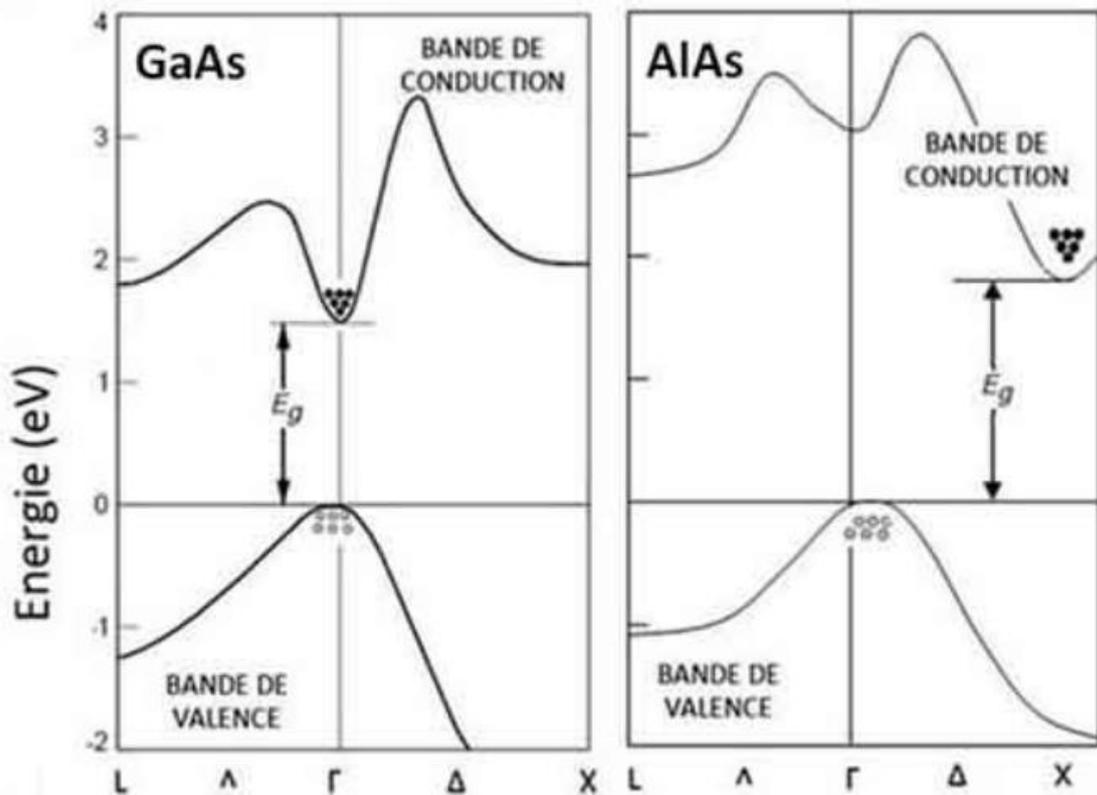


Figure II.4 : Structure de bande d'énergie pour le GaAs et le AlAs à 300K. [44]

A température ambiante ($T = 300\text{K}$), le gap de GaAs (E_g) est 1.424 eV ($x = 0$) alors que celui d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ dépend de la composition x en aluminium [44-46-48] :

$$E_g(x) = \begin{cases} 1.424 + 1.247x & 0 < x < 0.45 \\ 1.9 + 0.125x + 0.143x^2 & 0.45 < x < 1 \end{cases} \quad (\text{II-2})$$

L'énergie entre les différentes vallées (Γ , X et L) de la bande de conduction et le haut de la vallée Γ de la bande de valence sont données en (eV) par les équations suivantes [48 ,51] :

$$\begin{aligned} E_{\Gamma-\Gamma} &= 1.519 + 1.155x + 0.37x^2 \\ E_{X-\Gamma} &= 1.900 + 0.125x + 0.143x^2 \\ E_{L-\Gamma} &= 1.708 + 0.642x^2 \end{aligned} \quad (\text{II-3})$$

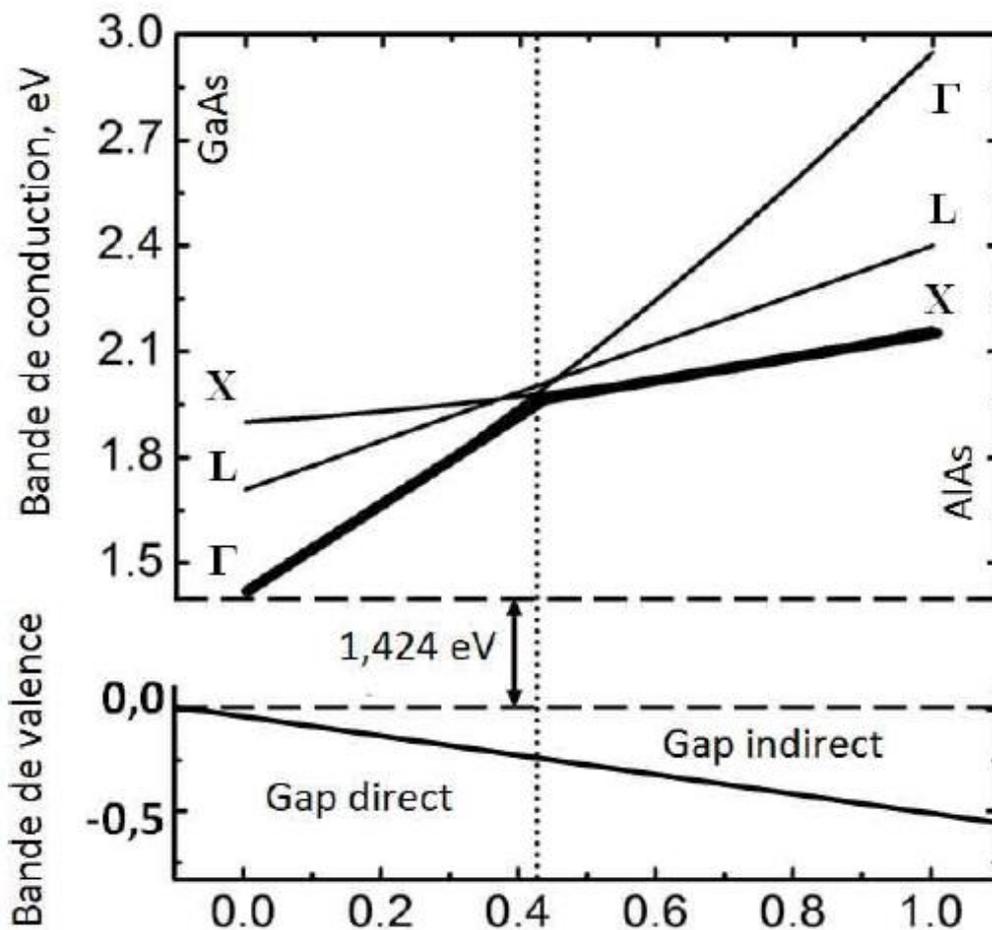


Figure II.5 : Energie de différentes vallées de la bande de conduction par rapport au point Γ de la bande de valence en fonction du taux d'aluminium [48-51].

La nature de la transition énergétique de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ change selon le taux d'aluminium x ($0 < x < 1$) (figure II. 5). Pour une fraction d'aluminium $x \leq 0.43$ [48], la transition de l'alliage est identique à celle du GaAs caractérisée par une transition directe (le bas de la bande de conduction est la vallée Γ). Quand le taux d'aluminium devient supérieur à ~ 0.45 la transition devient indirecte comme celle de l'AlAs (le bas de la bande de conduction se déplace vers la vallée X). Donc, l'augmentation de la fraction molaire x d'aluminium a pour conséquence l'augmentation de la bande interdite de la couche d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ qui module la profondeur de l'hétérojonction, et l'épaisseur de la couche d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ influe aussi sur la forme du puits quantique.

La largeur de la bande interdite des énergies $E_{\Gamma-\Gamma}$, $E_{X-\Gamma}$, $E_{L-\Gamma}$ décroît avec la température, et ces variations peuvent être décrites approximativement par la formule empirique de Varshni [52-53] pour des températures supérieures à 300 K :

$$\begin{aligned}
 E_{\Gamma-\Gamma}(T) &= E_{\Gamma-\Gamma}(0) - 5.41 \times 10^{-4} \times \frac{T^2}{T + 204} \\
 E_{X-\Gamma}(T) &= E_{X-\Gamma}(0) - 4.6 \times 10^{-4} \times \frac{T^2}{T + 204} \\
 E_{L-\Gamma}(T) &= E_{L-\Gamma}(0) - 6.05 \times 10^{-4} \times \frac{T^2}{T + 204}
 \end{aligned}
 \tag{II-4}$$

D'où les valeurs des énergies $E_{\Gamma-\Gamma}(0)$, $E_{X-\Gamma}(0)$, $E_{L-\Gamma}(0)$ à la température zéro degré Kelvin sont données par les équations (II-4).

On peut résumer les propriétés physique du AlAs et GaAs [54] dans le tableau suivant [44,49-50] :

Tableau II.2 : Propriétés physiques du AlAs et GaAs à T=300K.

	Symbole	AlAs	GaAs
Structure		Zinc-blend	Zinc-blend
Gap		Indirect	Direct
Paramètre de maille	a_0 [Å]	5.6611	5.6533
Energie interdite (de gap)	E_g [eV]	2.36 à 300K 2.23 à 0K	1.42 à 300K 1.52 à 0K
Concentration intrinsèque des porteurs	n_i [cm ⁻³]	10	2.10^6
Densité	d [g.cm ⁻³]	3.76	5.318
Mobilité des électrons	μ_n [cm ² .V ⁻¹ .s ⁻¹]	280	8500
Mobilité des trous	μ_p [cm ² .V ⁻¹ .s ⁻¹]	-	400
Champ de claquage	E_B [V.cm ⁻¹]	-	4.10^5
Vitesse de saturation	v_{sat} (10 ⁷ cm.s ⁻¹)	-	2
Constant de diffusion des électrons	D_n [cm ² .s ⁻¹]	5.2	220
Constant de diffusion des trous	D_h [cm ² .s ⁻¹]	2.6	10
Affinité d'électron	χ [V]	3.5	4.07
Masse effective des électrons	m_n^* [kg]	$0.146m_0$	$0.067m_0$
Masse effective des trous lourds	m_p^* [kg]	$0.76m_0$	$0.45m_0$
Température de fusion	T_f [K]	1870	1510

Lors de la mise en contact d'une couche d'AlGaAs et d'une couche de GaAs, la différence en énergies ΔE_g [46] des gaps est répartie d'une façon différente entre la bande de conduction (ΔE_c) et la bande de valence (ΔE_v) [55]. La détermination exacte des affinités électronique est difficile, la mécanique quantique permet d'écrire pour l'hétérostructure AlGaAs/GaAs :

$$\begin{aligned} \Delta E_c &= (0.85 \pm 0.03) \times \Delta E_g \\ \Delta E_v &= (0.15 \pm 0.03) \times \Delta E_g \end{aligned} \quad (\text{II-5})$$

$\Delta E_g = \Delta E_{g1} - \Delta E_{g2}$: La discontinuité de la bande de conduction correspond à la différence des affinités électroniques des deux matériaux :

$$\Delta E_c = \chi_{GaAs} - \chi_{AlGaAs} \quad (\text{II-6})$$

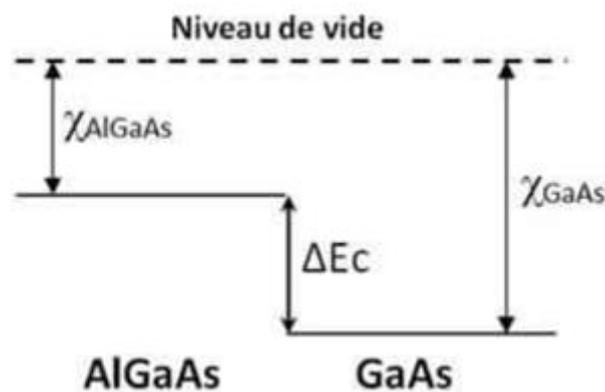


Figure II. 6 : Discontinuité de la structure de bande de conduction entre AlGaAs/GaAs.

Quelques propriétés des électrons et des trous de GaAs et $Al_xGa_{1-x}As$ [46] sont présentées dans le tableau ci-dessous :

Tableau II.3 : Propriétés cristallines et électroniques de l' $Al_xGa_{1-x}As$ déduites à partir de celles du GaAs.

Paramètre	GaAs	$Al_xGa_{1-x}As$
Constante de maille (Å^0)	5.6533	$5.6533 + 0.0078x$
Constante diélectrique ϵ_r	13.18	$13.18 - 3.12x$
L'affinité électronique (eV)	4.07	$4.07 - 1.1x \quad 0 \leq x \leq 0.45$ $3.64 - 0.14x \quad 0.45 \leq x \leq 1$
Mass effective des électrons $m_e (m_0)$ (kg)	0.067	$0.067 + 0.083x \quad 0 \leq x \leq 0.45$ $0.85 - 0.14x \quad 0.45 \leq x \leq 1$
Mass effective des trous $m_h(m_0)$ (kg)	0.62	$0.62 + 0.14x$

II.4 Discontinuité de bandes aux hétérojonctions "offset" ΔEC

Depuis de nombreuses années, la physique des hétérostructures à base de semiconducteurs s'est développée parallèlement à celle des semiconducteurs massifs. Si bien qu'il est désormais possible de réaliser, par épitaxie sous jets moléculaires, des empilements de couches minces (d'épaisseur typiquement inférieure à 30 nm) de deux semiconducteurs de bandes interdites différentes. La définition du puits quantique implique l'existence de trois types de puits [56].

II.4.1 Puits quantiques de type I

Des puits quantiques de type-I où les électrons et les trous sont confinés dans le même matériau constituant le puits. L'énergie du photon dépend des énergies de confinement des porteurs et du gap du matériau puits.

II.4.2 Puits quantiques de type II

Des puits quantiques de type-II où les porteurs sont confinés dans deux matériaux adjacents. Dans ce cas, l'énergie du photon est fonction des énergies de confinement des porteurs mais aussi des gaps des deux matériaux formant l'hétérostructure,

II.4.3 Puits quantiques de type III

La configuration dite de type-III qui est un cas particulier du type-II dans lequel le bas de la bande de conduction se trouve en dessous du haut de la bande de valence. Cette situation appelé aussi configuration semi-métallique, Elle offre une grande souplesse dans le choix de la longueur d'onde d'émission puisque l'énergie du photon émis n'est alors fonction que des énergies de confinement des électrons et des trous, donc des épaisseurs des couches, Voir la figure II-7.

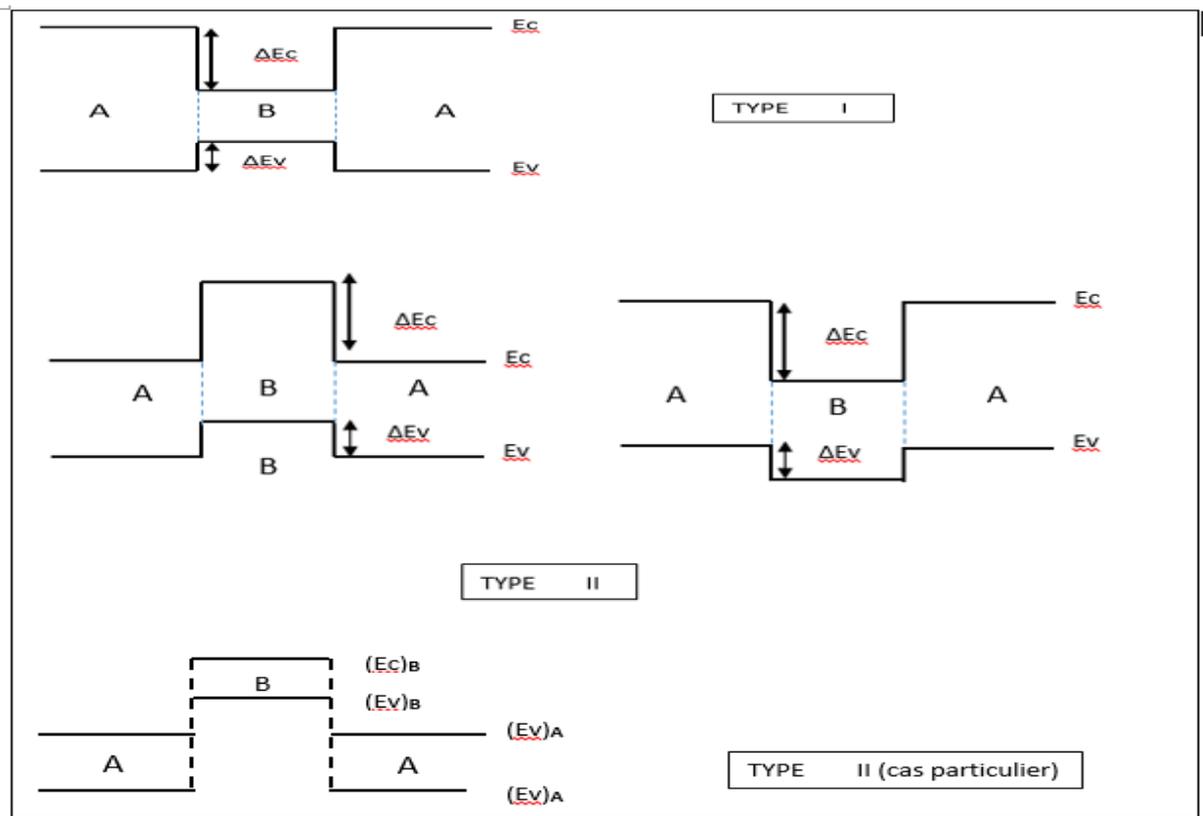


Figure II.7. Divers types d'hétérojonctions définis par la position relative des Bandes des semiconducteurs A et B ; le type I est le plus utilisé.

II.5 Ingénierie énergétique : effets de taille quantique

II.5.1 Principe

Les nanostructures sont caractérisées par des propriétés nouvelles et intéressantes qui peuvent être tout à fait différentes de celles du matériau massif. À l'échelle nanométrique, les énergies caractéristiques des niveaux électroniques, leurs interactions avec les photons ainsi que les modes de vibrations des atomes sont profondément modifiés par rapport à leurs valeurs dans le solide massif. Cette structuration à l'échelle nanométrique va donc pouvoir ouvrir de nouvelles possibilités dans le processus de conversion photovoltaïque. Plus la dimension de ces nano-objets diminue par rapport au matériau massif, plus l'écart entre leurs propriétés physiques et celles sous leur forme massive devient important. En particulier, la réduction de la taille des cristaux semi-conducteurs à des grandeurs nanométriques produit des effets particuliers tels que le confinement quantique. Aux échelles nanométriques, les électrons se comportent plus comme des ondes que comme des particules, et donc comme les phénomènes que l'on ne peut localiser sans affecter profondément les niveaux d'énergie accessibles (principe d'incertitude de Heisenberg).

En réduisant une, puis deux, puis trois dimensions, on obtient respectivement des puits, des fils puis des boîtes. Les densités d'états quantiques et les dispersions d'énergie en fonction du vecteur d'onde ($k = 2\pi/\lambda$) pour les cas précédemment cités sont montrées dans la Figure II.8. Dans les boîtes quantiques par exemple, l'énergie ne varie plus de manière continue. C'est cette propriété des boîtes qui fait leur intérêt principal pour la réalisation de nombreuses applications, notamment en photovoltaïque [57-59].

Ces boîtes quantiques peuvent également constituer, par de nombreux aspects, des « atomes artificiels ». Parler de confinement implique aussi un matériau confinant : les boîtes aussi bien que les fils et les puits doivent être enrobés dans un matériau dans lequel les fonctions d'onde des électrons ne se recouvrent pas de façon importante. Dans le cas des nanocristaux de semi-conducteurs tels que silicium, germanium ou sulfure de plomb, l'enrobage est en général une matrice isolante permettant le transfert des électrons d'une nanostructure à l'autre par effet tunnel.

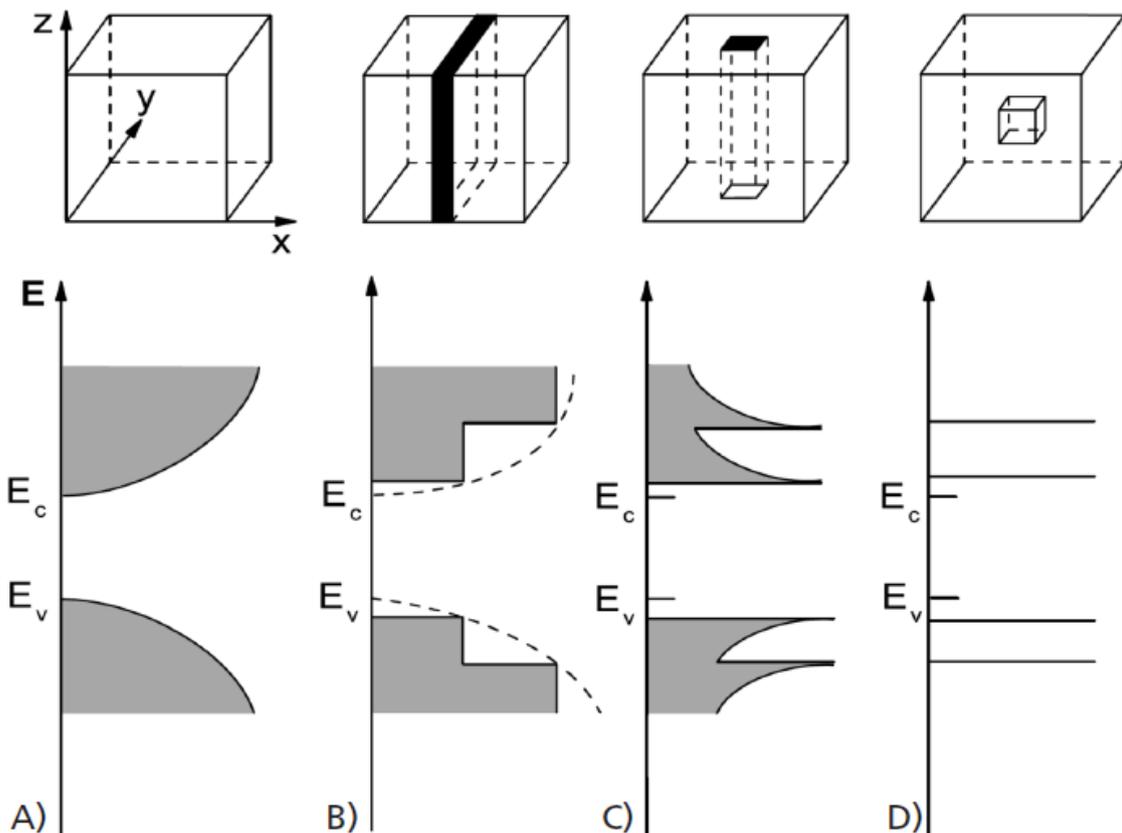


Figure II.8 : Densité d'état dans différentes configurations de confinement : A) matériau massif ; B) puits quantique ; C) fil quantique ; D) boîte quantique. La bande de conduction E_c se divise en sous-bandes se chevauchant et devenant de plus en plus étroites avec le confinement des électrons dans les différentes directions [60].

II.6 Les hétéro structures

Depuis les premiers travaux en 1970 de L. Esaki et R. Tsu [61] sur les couches minces semi-conductrices, grâce à l'évolution de la nanotechnologie, la recherche fondamentale et appliquée sur les hétérostructures semi-conductrices a bien avancé. Les puits quantiques sont les premières structures réalisées. En 1978, pour la première fois la technique de dopage sélectif a été appliquée dans les hétérojonctions GaAs/ AlGaAs par Dingle et Störmer [62]. Les multi-puits quantiques et l'hétérojonction à dopage modulé font l'objet de nombreuses études dans la physique microscopique.

II.6.1 Structure à multi-puits quantiques

II.6.1.1 Description

Les structures à multiples puits quantiques sont des matériaux semi-conducteurs artificiels obtenus par croissance alternée de fines couches de matériaux présentant un paramètre de maille identique ou voisin mais ayant une énergie de bande interdite différente. Ceci permet d'avoir des hétéro-interfaces sans défaut, sans contrainte et de hautes qualités. Au cours du processus de la croissance, les dopants sont introduits dans la barrière, une couche séparatrice d'AlGaAs non-dopée est mise entre la barrière et le puits permettant de faire varier la mobilité des électrons situés à l'interface du GaAs et de l'AlGaAs (figure II.9). L'épaisseur de cette couche séparatrice est de l'ordre de 15 nm [63].

Du fait de la discontinuité de la bande de conduction (et la bande de valence) à l'interface, les donneurs transfèrent donc spontanément et irréversiblement leurs électrons dans le Semi-conducteur de faible bande interdite (GaAs). Les porteurs du gaz bidimensionnel d'électrons (ou de trous) formés à l'interface d'AlGaAs et GaAs sont confinés suivant la direction de croissance z et sont libres dans les deux autres directions x, y . Les électrons sont confinés selon la direction z par un potentiel de confinement $V(z)$. Ce potentiel est composé d'une part la discontinuité de la bande de conduction ΔE_C et d'autre part du potentiel électrostatique $\Phi(z)$ issu du processus de transfert de charges. Le potentiel électrostatique dépend de la charge d'espace $\rho(z)$ à l'interface et de la constante diélectrique suivant la loi de Poisson :

$$\frac{d^2\phi}{dz^2} = -\frac{\rho(z)}{\varepsilon} \quad (\text{II.6})$$

La structure composée d'un réseau périodique de telles hétérojonctions est caractérisée par l'épaisseur de couche du matériau de faible énergie de bande interdite L_z . L'axe perpendiculaire

à la direction de croissance est pris comme étant l'axe z . L'épaisseur du matériau de grande bande interdite sera notée L_b , Ces deux matériaux composent respectivement le puits et la barrière (pour barrière de potentiel vue par un porteur). Un tel assemblage de structures à puits quantiques multiples permet d'observer des propriétés physiques nouvelles [64-65] liée à l'existence d'effets quantiques, dus à la dimension de ces couches rapportées à la fonction d'onde attachée aux porteurs (électrons et trous) caractérisée spatialement par la longueur d'onde de de Broglie. Les énergies et fonctions d'ondes des électrons et des trous se trouvent donc modifiées d'une façon significative comparativement à celles attachées aux porteurs localisés dans un matériau massif. De plus, des états d'énergie discrets (quantifiés) sont créés dans les bandes de conduction et de valence du matériau. Les porteurs sont pour l'essentiel confinés dans le plan des couches venant réduire les degrés de liberté de ces particules ou quasi-Particules. D'où, par exemple, la dénomination de gaz d'électrons bidimensionnels (2D) employée pour décrire ce type de porteur localisé dans un puits quantique [59]. On peut abaisser la dimensionnalité des porteurs en réalisant par exemple des fils quantiques (gaz d'électrons unidimensionnel : 1D) ou des boîtes quantiques (OD).

Sur la figure II.9, sont représentées la séquence périodique des couches constituant un MPQ, la variation périodique des énergies de bandes interdites et la répartition de leurs discontinuités dans les bandes de conduction et de valence. Cette discontinuité de la bande interdite affecte pour l'essentiel la bande de conduction pour les composés GaAs/AlGaAs.

Les états discrets (valeurs propres) et autorisés pouvant être pris par les électrons et les trous sont déterminés en résolvant l'équation de Schrödinger et en égalant la valeur prise par la fonction d'onde (fonction propre) aux interfaces (conditions limites). Les niveaux d'énergie sont déterminés en considérant le modèle du puits de potentiel de profondeur finie, la discontinuité de bande pour les structures de bandes de conduction et de valence étant obtenue à partir des relations précédentes.

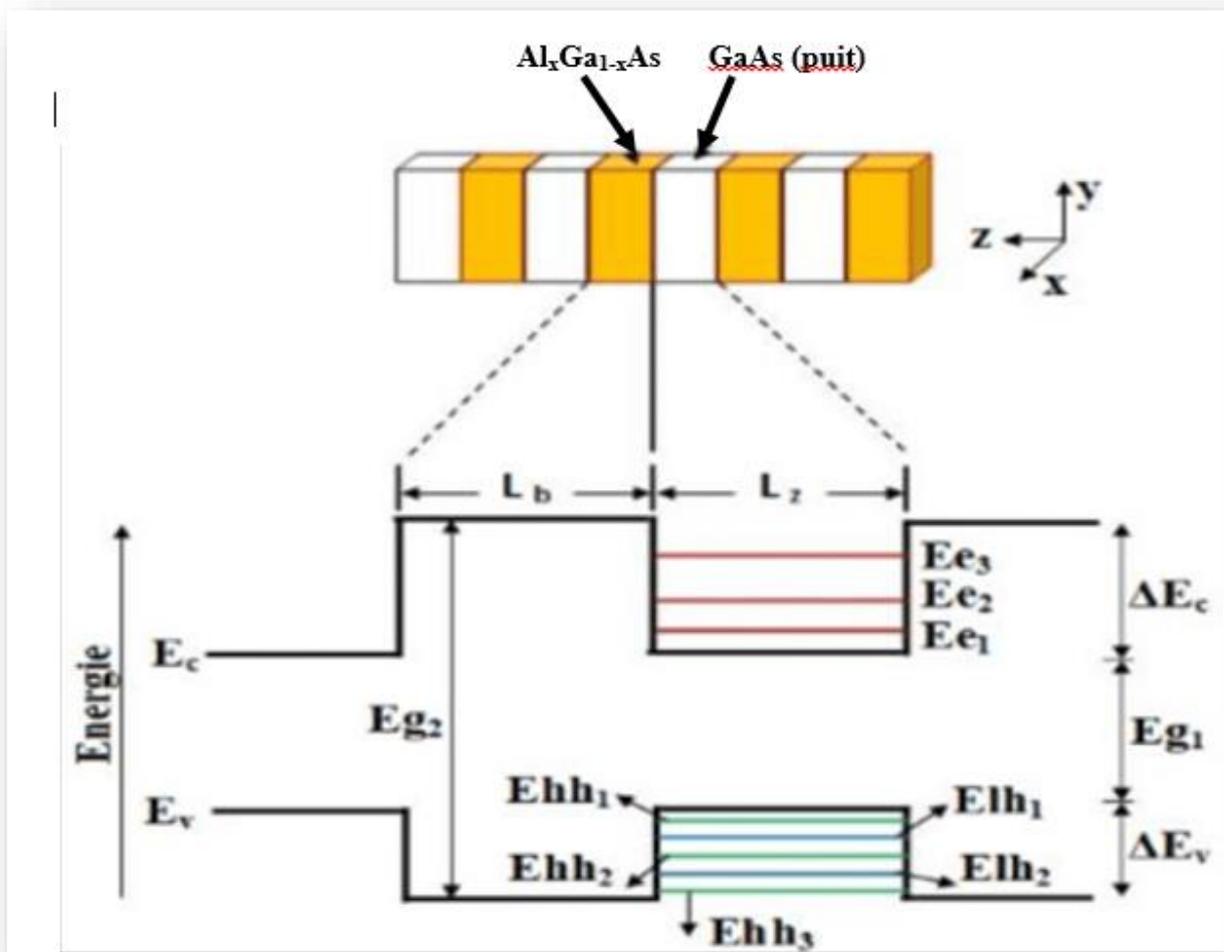


Figure II.9 : Séquence périodique des couches d'une structure à Multi Puits Quantiques
 Profil des puits de potentiels dans la bande de valence et de conduction.
 Représentation schématique de la structure des niveaux.

II.6.1.2 Puits quantiques

Un puits quantique est formé par une fine couche semi-conductrice A (matériau puits GaAs) placée entre deux couches d'un semi-conducteur B (matériau barrière $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$). Dans le formalisme de la fonction enveloppe, le Hamiltonien d'une telle structure s'écrit [66] :

$$H = E_b + V(z) - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \nabla_{\perp}^2, \quad (\text{II-7})$$

où l'énergie de bande E_b est nulle pour la bande de valence, et vaut $E_b = E_g$, la largeur de la bande interdite du matériau massif B, pour la bande de conduction ; et m_{\perp} est la masse effective

dans le plan des couches (dont on néglige la dépendance en z) et $m(z)$ la masse effective dans la direction de croissance z :

$$m(z) = \begin{cases} m_A & \text{dans le matériau A} \\ m_B & \text{dans le matériau B.} \end{cases}$$

$V(z)$ est le potentiel du puits quantique, représenté en figure II.10.a :

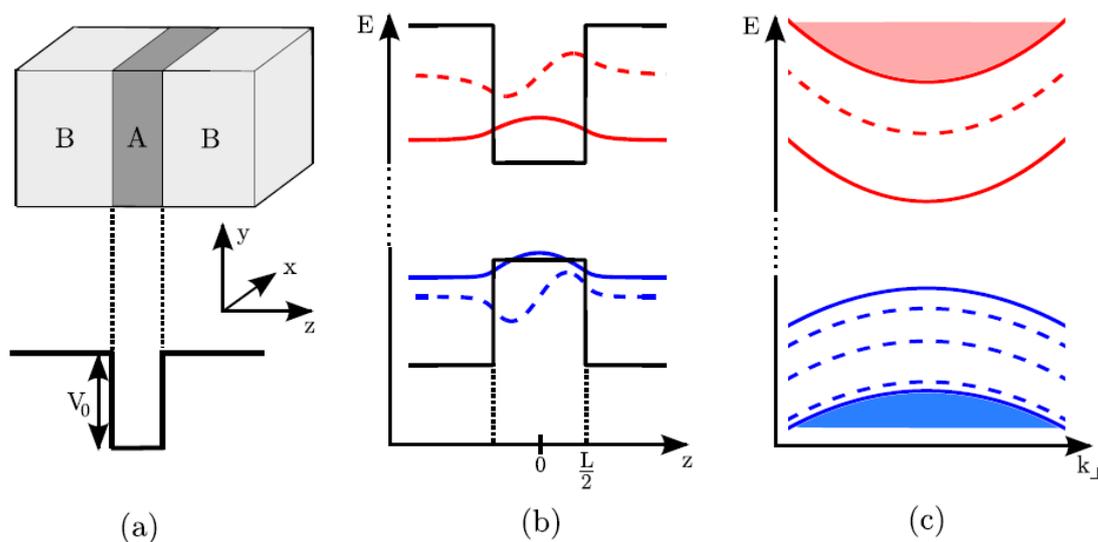


Figure II.10 : (a) Représentation schématique d’un puits quantique et du potentiel résultant. (b) Structure de bande d’un puits quantique GaAs/Al_xGa_{1-x}As et trace des fonctions d’onde des deux premiers états confinés pour les électrons et les trous lourds. (c) Allure des relations de dispersion du puits quantique (b), en fonction du vecteur d’onde k_{\perp} dans le plan des couches.

$$V(z) = \begin{cases} V_0 & \text{dans le matériau A} \\ 0 & \text{dans le matériau B.} \end{cases}$$

La figure II.10.a représenté un puits quantique, avec le potentiel $V(z)$ résultant. Le potentiel de l’hétérostructure étant indépendant de x et y , on peut rechercher les états propres électroniques sous forme séparable :

$$\psi(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{ik_x x + ik_y y} \chi(z) \tag{II-8}$$

La fonction d’onde χ est alors solution de l’équation aux valeurs propre :

$$H_z \chi(z) = \left[V(z) - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} \right] \chi(z) = E_z \chi(z), \text{ avec} \quad (\text{II-9})$$

$$E_z = E - E_b - \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m_{\perp}}$$

Dans la suite de cette thèse, on étudiera plus spécifiquement le cas des puits de GaAs avec des barrières d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, pour lesquels l'approximation de la fonction enveloppe est particulièrement adaptée car les mailles élémentaires des deux matériaux ont des symétries et des dimensions très similaires. Pour ce type de puits, $V_0^c < 0$ et $V_0^v > 0$, par conséquent la bande de conduction et la bande de valence comportent toutes deux des états localisés au voisinage du matériau puits. Il s'agit des états d'énergie négative, $E_z < 0$, pour la bande de conduction et des états d'énergie positive, $E_z > 0$, pour la bande de valence car la masse effective de valence est négative. La figure II.10.b représente la structure de bande d'un puits quantique GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, ainsi que l'allure des fonctions d'onde des états localisés. Pour calculer ces fonctions d'onde, on pose $k_A = \frac{\sqrt{2m|E_z - V_0^c|}}{\hbar}$ et $k_B = \frac{\sqrt{2m|E_z|}}{\hbar}$. Le potentiel $V(z)$ étant pair, les fonctions propres sont paires ou impaires :

$$\chi(z) = \begin{cases} \alpha \cos(k_A z) & \text{si } |z| < \frac{L}{2} \\ \beta e^{-k_B |z|} & \text{si } |z| > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (\text{II-10})$$

pour les états pairs, et

$$\chi(z) = \begin{cases} \alpha \sin(k_A z) & \text{si } |z| < \frac{L}{2} \\ \beta e^{-k_B z} & \text{si } z > \frac{L}{2} \\ -\beta e^{k_B z} & \text{si } z < -\frac{L}{2} \end{cases} \quad (\text{II-11})$$

pour les états impairs.

De plus, χ et $\frac{1}{m(z)} \frac{\partial \chi}{\partial z}$ sont continués aux interfaces entre A et B. Cette condition n'est vérifiée que pour un ensemble discret de valeurs de l'énergie E_z .

On note E_n ces valeurs et $|k_{\perp}, n\rangle$ les états propres correspondants, avec $k_{\perp} = (k_x, k_y)$ le vecteur d'onde dans le plan des couches. La figure II.10.c montre la relation de dispersion du puits quantique. A chaque niveau localise n correspond une dispersion parabolique,

$$E = E_b + E_n + \hbar^2 \frac{k_{\perp}^2}{2m_{\perp}} \quad (\text{II-12})$$

Les états tels que $E_z > 0$ pour la bande de conduction et $E_z < 0$ pour la bande de valence sont délocalisés suivant z et forment un continuum d'énergie, également représenté en figure II.10.c.

❖ La densité d'état

Le mouvement des porteurs (trous et électrons) est donc limité à deux dimensions. Dans un système à n dimensions, la densité d'états dans l'espace des k est donnée, compte tenu du spin, par :

$$g(k) = \frac{2}{(2\pi)^n} \quad (\text{II-13})$$

Le système étant ici réduit à deux dimensions, la densité d'états s'écrit :

$$g(k) = \frac{2}{(2\pi)^2} \quad (\text{II-14})$$

Ainsi sur le disque de rayon $k_{//} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ le nombre d'états est donné par

$$N(k_{//}) = \frac{2}{(2\pi)^2} \pi k_{//}^2 \quad (\text{II-15})$$

Si on prend dans chacune des sous-bandes, l'origine des énergies au bas de la sous-bande, l'énergie s'écrit :

$$E = \frac{\hbar^2 k_{//}^2}{2m} \quad (\text{II-16})$$

De sorte que

$$k_{//}^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad (\text{II-17})$$

En explicitant $k_{//}$ en fonction de l'énergie en prenant comme origine des énergies dans chacune des sous-bandes, le bas de sous-bande :

$$N(E) = \frac{2}{(2\pi)^2} \pi \frac{2m}{\hbar^2} E \quad (\text{II-18})$$

Ainsi la densité d'états dans l'espace des énergies s'écrit pour une sous-bande :

$$n_e(E) = \frac{dN(E)}{dE} = \frac{m}{\pi\hbar^2} \quad (\text{II-19})$$

C'est une caractéristique essentielle d'un système à deux dimensions, la densité d'états est constante en fonction de l'énergie. En tenant compte de toutes les sous-bandes la densité d'états s'écrit :

$$n_e(E) = \sum_n \frac{m}{\pi\hbar^2} Y(E - E_{en}) \quad (\text{II-20})$$

Où Y est la fonction de Heaviside. la courbe est représentée sur la figure (II.11).

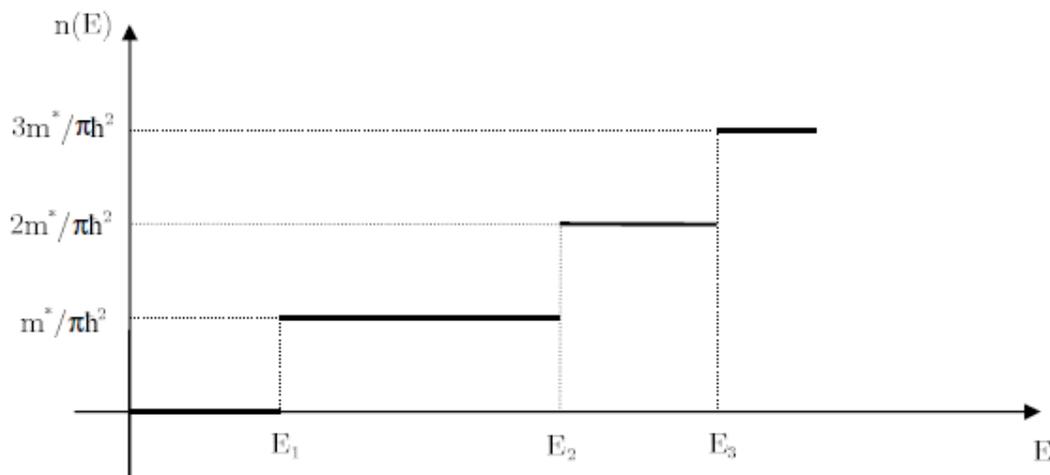


Figure II.11 : Densité d'état.

La densité d'état est une fonction en marche d'escalier. Cette densité d'état sur une marche, est indépendante de E et de l'épaisseur du puits. Enfin elle conserve une valeur finie lorsque E tend vers E_1 alors que dans le cas tridimensionnel, $n_e(E)$ tend vers zéro lorsque E tend vers E_g .

II.6.2 Super-réseaux de puits quantiques

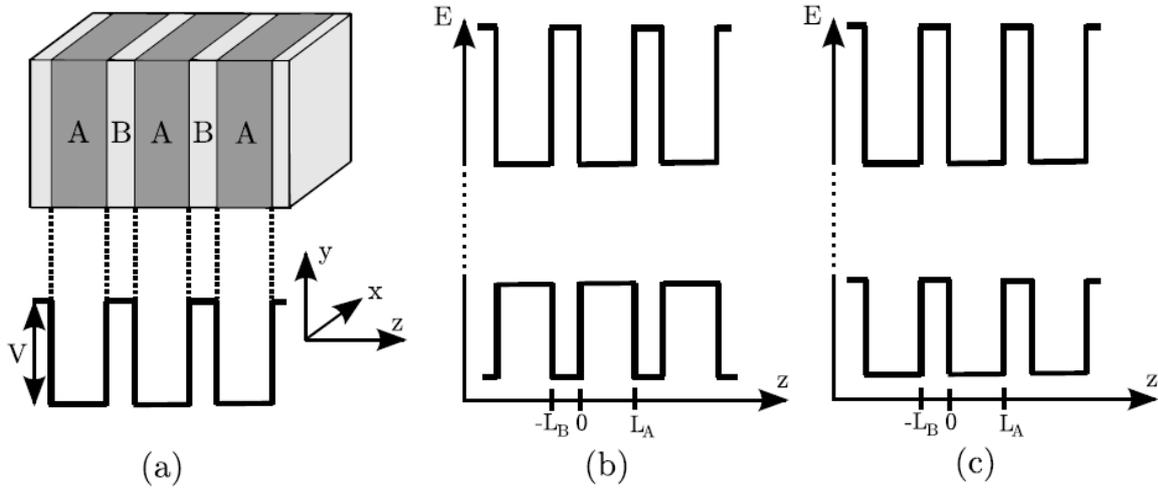


Figure II.12 : (a) Représentation schématique d'un super-réseau de puits quantiques.
 (b) Structure de bande d'un super-réseau de type I.
 (c) Structure de bande d'un super-réseau de type II.

Un super-réseau est un assemblage périodique de puits quantiques accolés (figure II.12.a). Suivant les matériaux utilisés, le super-réseau est de type I (structure de bande en figure II.12.b) si $V_0^c > 0$ et $V_0^v < 0$, auquel cas les électrons et les trous sont confinés dans le semi-conducteur A, ou de type II (structure de bande en figure II.12.c), les électrons étant alors confinés dans un matériau et les trous dans l'autre. Dans cette étude, on s'intéressera aux super-réseaux de type I, et plus particulièrement aux super-réseaux GaAs/Al_xGa_{1-x}As.

Comme pour le puits quantique, les fonctions propres sont séparables et on écrit :

$$H_z \chi(z) = \left[V(z) - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} \right] \chi(z) = E_z \chi(z), \quad (\text{II-21})$$

où cette fois, le potentiel $V(z)$ est périodique de période $d = L_A + L_B$. En choisissant des conditions aux limites périodiques $\chi(z + Nd) = \chi(z)$, avec N le nombre total de périodes, on peut appliquer le théorème de Bloch et rechercher les états propres sous la forme $\chi_{k_z}^B(z) = e^{ik_z z} u_{k_z}(z)$, avec u_{k_z} d -périodique. Les fonctions de Bloch peuvent être déterminées par un calcul direct ou par un calcul approché utilisant l'approximation des liaisons fortes.

❖ **Calcul direct**

Par le calcul direct, il est suffisant de déterminer $\chi_{k_z}^B(z)$ sur l'intervalle $[0, d]$. Comme pour le puits quantique, on décompose :

$$\chi_{k_z}^B(z) = \begin{cases} \alpha_c \cos(k_A z) + \alpha_s \sin(k_A z) & \text{si } z < L_A \\ \beta_+ e^{-k_B(z-L_A)} + \beta_- e^{k_B(z-L_A)} & \text{si } z > L_A \end{cases} \quad (\text{II-22})$$

La continuité à l'interface impose :

$$\chi(L_A^-) = \chi(L_A^+), \quad \text{et} \quad m_B \left. \frac{d\chi}{dz} \right|_{L_A^-} = m_A \left. \frac{d\chi}{dz} \right|_{L_A^+} \quad (\text{II-23})$$

De plus, par périodicité de u_{k_z} ,

$$\chi(d^-) = \chi(0^+) e^{ik_z d}, \quad \text{et} \quad m_A \left. \frac{d\chi}{dz} \right|_{d^-} = m_B \left. \frac{d\chi}{dz} \right|_{0^+} e^{ik_z d} \quad (\text{II-24})$$

Ces 4 égalités fournissent 4 équations pour les variables α_c , α_s , β_+ , β_- . Celles-ci n'ont des solutions non-nulles que pour certaines valeurs discrètes de l'énergie, $E_z = E_n(K_z)$. L'ensemble des états K_z pour un niveau n données est appelé mini bande, car pour N grand, il s'agit d'un quasi-continuum d'états.

❖ **Les effets excitonique**

Les effets excitonique sont augmentés lorsque la dimensionnalité des porteurs se trouve réduite. Le concept d'exciton est introduit lorsque l'on inclut le couplage électron-trou par l'intermédiaire d'une interaction Coulombienne.

Le Hamiltonien peut donc s'écrire :

$$H = H_{ze} + H_{zh} + H_{eh} \quad (\text{II-25})$$

si z est remplacé par z_i dans l'équation (II.21). z_i représente les coordonnées perpendiculaires au plan des puits des porteurs de type i . ρ détermine la coordonnée il associée au mouvement relatif des électrons et des trous.

Le Hamiltonien H_{eh} a la forme générale [110]:

$$H_{eh} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} \right] - \frac{q^2}{\varepsilon \sqrt{(z_e - z_h)^2 + \rho^2}} \quad (\text{II-26})$$

où μ est la masse réduite effective dans le plan des couches définies par :

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h} \quad (\text{II-27})$$

Spécifique à chaque combinaison de sous-bandes pour les électrons et trous. Dans ces conditions, l'équation de Schrödinger caractérisant les états excitonique s'écrit :

$$H\chi = E\chi \quad (\text{II-28})$$

que l'on peut résoudre en utilisant le principe de séparation des variables pour décrire la fonction d'onde, Soit :

$$\chi(z_e, z_h, \rho) = \psi_e(z_e)\psi_h(z_h)\varphi_{eh}(\rho) \quad (\text{II-29})$$

où ψ_i représente la fonction d'onde des électrons et des trous pris individuellement, à partir de cette définition, l'équation de Schrödinger peut être résolue en employant la fonction d'onde de type vibrationnelle (Equation.II.25) [110]:

$$\varphi_{eh}(\rho) = \frac{\sqrt{2\pi}}{\lambda_e} \exp\left(-\frac{\rho}{\lambda_e}\right) \quad (\text{II-30})$$

où le paramètre ajustable λ_e détermine le rayon de Bohr de l'exciton, lequel minimise l'énergie de liaison de l'exciton :

$$E_b = \langle \chi | H_{eh} | \chi \rangle \quad (\text{II-31})$$

Un des résultats essentiels de cette analyse montre qu'un confinement quantique 2D augmente l'énergie de liaison des excitons et la force d'oscillateur qui lui est attachée.

Les propriétés ultimes de cet accroissement peuvent s'écrire :

$$E_b(2D) = 4E_b(3D) \quad (\text{II-32})$$

c'est -à-dire que l'on augmente d'un facteur 4 l'énergie de liaison dans une structure à puits quantique comparativement à celle caractérisant un exciton créé dans un matériau massif (3D),

Cela se traduit par l'observation d'un pic d'absorption visible à température ambiante et spécifique aux états excitoniques.

Ainsi, l'énergie nécessaire à la formation d'un exciton est donnée par l'expression :

$$E = E_g + E_{en} + E_{hn} - E_b \quad (\text{II-33})$$

E_b étant dépendant du type d'exciton considéré, E_n effet, deux types d'excitons existe dans les matériaux III-V, à l'image des deux sous-bandes de valence correspondant aux trous lourds (hh : pour heavy hole) et légers (lh : pour light hole). Ainsi, l'interaction Coulombienne entre un électron et un trou lourd dans le n-ième état lié au puits donne naissance à l'exciton lourd en - hhn et le même type d'interaction entre un électron et un trou léger contribue à la création d'un exciton léger $e_n - lh_n$. Ainsi, pour les énergies définies par :

$$\left. \begin{aligned} E &= E_g + E_{en} + E_{hnn} - E_{bhh} \\ &\quad \text{et} \\ E &= E_g + E_{en} + E_{lhn} - E_{blh} \end{aligned} \right\} \quad (\text{II-34})$$

On observera des bandes d'absorptions spécifiques aux espèces excitonique.

II.6.2.1 Propriétés optiques

Comme cela était rappelé précédemment, les structures des multi -puits quantiques présentent une forte résonance excitonique à température ambiante due au confinement des porteurs dans le puits quantique et qui en conséquence augmente l'énergie de liaison des excitons. Ces structures ont également une particularité au niveau de la dépendance spectrale du coefficient d'absorption liée aux états quantifiés des porteurs. Dans un tel matériau, le coefficient d'absorption s'écrit :

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi q^2}{n_r c m_0^2 \omega} \sum_i \sum_j |\langle \chi_{v,i} | \chi_{c,j} \rangle|^2 \left(\frac{\mu}{\pi \hbar^2} \right) |eM_{cv}|^2 \sum_n Y(\hbar\omega - E_{gn}) \quad (\text{II-35})$$

avec :

$$E_{gn} = E_g + E_{en} + \begin{cases} E_{hnn} \\ E_{lhn} \end{cases}$$

$|eM_{cv}|^2$: est l'élément de matrice entre les fonctions atomiques de conduction et de valence. Il s'agit d'une constante caractéristique du matériau, il est donné par l'élément de matrice de Kane :

$$|eM_{cv}^{hh}|^2 = 3|eM_{cv}^{lh}|^2 = \frac{E_P}{4m_0} \quad (\text{II-36})$$

selon le type de sous-bande de valence considéré. Y désigne la fonction de Heaviside, μ est la masse réduite. Dans la sommation, à chaque valeur de n correspond une transition électron-trou lourd ($\hbar\omega = E_g + E_{hhn} + E_{en}$) et une transition électron-trou léger ($\hbar\omega = E_g + E_{lhn} + E_{en}$). E_g est l'énergie de bande interdite du matériau de puits, E_e et E_{jh} sont les énergies des particules dans leurs bandes respectives (j signifiant h ou l). Pour les semiconducteurs III-V.

Cette particularité du spectre d'absorption d'une structure à puits quantiques provient de la distribution de la densité d'états qui présente une dispersion avec l'énergie sous forme de marches d'escalier, qui apparaissent à chaque sous bande. Ainsi, l'existence d'états quantiques peut être directement sondée en observant le spectre d'absorption du matériau. A cette structure de bande d'absorption, vient se superposer celle des excitons constituée de pics localisés au voisinage de la bande interdite du matériau et des sous bandes définies par les règles de quantification des porteurs dans le puits.

Le coefficient d'absorption modélisant les transitions excitonique pour une onde optique se propageant perpendiculairement aux couches des multi-puits quantiques peut s'écrire :

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi q^2}{n_r c m_0^2 \omega} \sum_i \sum_j |\langle \chi_{v,i} | \chi_{c,j} \rangle|^2 \left(\frac{\mu}{\pi \hbar^2} \right) |eM_{cv}|^2 \sum_n [|f_i|^2 \delta(\hbar\omega - E_n)] \quad (\text{II-37})$$

n_r est l'indice de réfraction optique que l'on considère comme constant, δ est une fonction de distribution gaussienne caractérisant le profil d'absorption des excitons, centrée sur l'énergie de transition excitonique E_n du MPQ.

Les coefficients f_i représentent les forces d'oscillateurs des transitions excitonique par unité de surface, Ce paramètre est proportionnel au carré de l'élément de matrice optique et au carré de l'intégrale de recouvrement entre les fonctions enveloppes des électrons et des trous contribuant à l'état excitonique.

$$f_i^2 = \frac{R_{cv}}{(1 - \nu)^2}$$

$$E_{excitation} = -\frac{13.6eV}{n^2 \epsilon^2 m_0} \mu = -R_{cv}$$

R_{cv} est le terme Rydberg efficace du matériaux et ν dimensionnalité de l'exciton (compris entre 0 et 0.5 en général).

Expression final d'absorption est comme suit :

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi q^2}{n_r c m_0^2 \omega} \sum_i \sum_j |\langle \chi_{v,i} | \chi_{c,j} \rangle|^2 \left(\frac{\mu}{\pi \hbar}\right) |eM_{cv}|^2 \sum_n \sum_n [Y(\hbar\omega - E_{gn})] + [|f_i|^2 \delta(\hbar\omega - E_n)] \tag{II-38}$$

Où $m_c=0.067m_0, n_r = 3.6, E_p = 23eV$ et prendre $|\langle \chi_{v,i} | \chi_{c,j} \rangle|^2 \sim 1$ dans les hétérostructure GaAs/Al_xGa_{1-x}As[61].

II.7 L'épitaxie par Jets moléculaires pour l'hétéro structures III-V

L'épitaxie par jets moléculaires EJM a été développée dans les années 1970 aux Etats Unis aux laboratoires Bell. La croissance s'effectue sous ultravide (pression résiduelle de 5.10^{-10} torr), sur un substrat monocristallin porté en température, où interagissent les flux atomiques ou moléculaires des éléments constituant les matériaux à épitaxie figure (II.13).

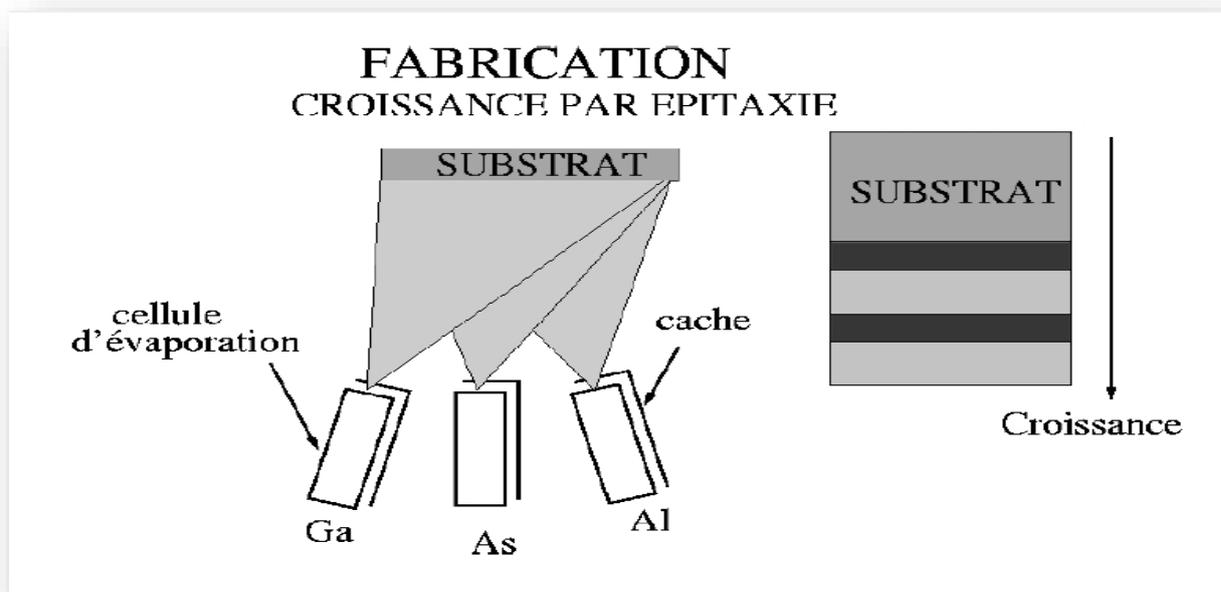


Figure II.13 : Schéma de principe d'une croissance en EJM [67].

Les flux atomiques ou moléculaires proviennent de la sublimation (évaporation) d'éléments appropriés. Le flux d'arsenic est constitué de molécules tétramères d'As₄ et les flux d'éléments III sont atomiques.

Les températures des éléments et du substrat sont choisies selon la méthode des trois températures régie par les conditions : $T_V < T_{\text{substrat}} < T_{\text{III}}$.

En résumé, les caractéristiques de la croissance en EJM sont les suivantes :

- ✓ La vitesse de croissance d'environ une monocouche par seconde permet de contrôler l'épaisseur des différentes couches d'une hétérostructure au plan atomique près.
- ✓ Le flux de chacun des éléments peut être interrompu par l'interposition en une fraction de seconde d'un cache devant la cellule d'effusion. Ceci permet la réalisation d'interfaces extrêmement abruptes.
- ✓ La température de croissance est assez basse pour éviter les phénomènes d'interdiffusion en volume au cours de la croissance, entre les différents alliages constituant l'hétérostructure.

En particulier, une diffusion des éléments dopants est ainsi évitée.

- ✓ L'ultra-vide nécessaire pour la croissance par EJM est compatible avec la méthode d'analyse in situ par diffraction RHEED. La technologie ultravide permet aussi la connexion du réacteur EJM à des chambres d'analyse de surface telle que l'effet Auger, l'XPS, le STM ou les chambres de dépôt d'oxydes ou de traitements plasma [68].

Chapitre III :
Modèle semi-analytique
du transport électronique
dans les cellules solaires à
puits quantiques

III.1 Introduction

La simulation d'une cellule solaire est basée sur la modélisation physique de sa structure, dans ce chapitre, on rappelle les principales notions des semi-conducteurs. Ensuite nous analysons les phénomènes qui interviennent dans le transport des charges, au niveau des différentes parties de la cellule solaire, où présentent plusieurs phénomènes physiques qui sont décrits par des modèles mathématiques. Ces modèles mathématiques forment un ensemble d'équations différentielles qui sont les équations de base qui décrivent le comportement statique et dynamique des porteurs de charges dans ces structures.

Nous présentons dans ce chapitre, les diverses méthodes numériques utilisées pour la discrétisation des équations aux dérivées partielles (EDP) caractéristiques aux phénomènes physiques à traiter. En particulier, la méthode des volumes finis (MVF) adoptée comme méthode de discrétisation dans le cadre de travail de cette thèse est détaillée. Le maillage utilisé dans la MVF est basé sur un maillage structuré. Nous présentons aussi les méthodes de résolutions des systèmes d'équations algébriques obtenus après avoir appliqué la MVF. À la fin de ce chapitre, nous exposerons, les différents modes utilisés pour le couplage, ainsi, que notre code de calcul développé et implémenté sous l'environnement MATLAB.

III.2 Le semi-conducteur

III.2.1 Le semiconducteur à l'équilibre thermodynamique

Dans un semi-conducteur, l'énergie de l'agitation thermique permet le passage d'un électron de la bande de valence à la bande de conduction laissant une lacune appelée «trou», un électron d'un atome voisin peut combler cette lacune, laissant à son tour un trou. Cette notion de trou permet d'introduire un deuxième mécanisme de conduction de charges positives (+e). Le nombre d'électrons libres dans la bande de conduction est donné par le produit de la densité d'états $N_c(E)$ par la fonction de distribution de Fermi Dirac $f_n(E)$ intégré sur toute la bande de conduction [69]:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} N_c(E) f_n(E) dE \quad (\text{III-1})$$

Où
$$N_c(E) = \frac{1}{2 \pi^2} \left(\frac{2m_c^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E - E_c)^{1/2} \quad (\text{III-2})$$

Et
$$f_n(E) = \frac{1}{1 + \exp \frac{E - E_f}{k_B T}} \quad (\text{III-3})$$

Cette intégrale donne :

$$n = N_c \exp \left(\frac{E_f - E_c}{k_B T} \right) \quad (\text{III-4})$$

Où
$$N_c = \frac{1}{4} \left(\frac{2 m_c^* k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \quad (\text{III-5})$$

D'une façon analogue, Le nombre de trous libres dans la bande de valence est donné par le produit de la densité d'états $N_v(E)$ par la fonction $f_p(E)$ égale à $(1 - f_n(E))$ intégré sur toute la bande de valence où $f_p(E)$ exprime la probabilité de trouver une place vacante de niveau d'énergie E :

$$n = \int_{-\infty}^{E_v} N_v(E) f_p(E) dE \quad (\text{III-6})$$

Où
$$N_v(E) = \frac{1}{2 \pi^2} \left(\frac{2m_v^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E_v - E)^{1/2} \quad (\text{III-7})$$

Le calcul donne alors :

$$p = N_v \exp \left(\frac{E_v - E_f}{k_B T} \right) \quad (\text{III-8})$$

Où
$$N_v = \frac{1}{4} \left(\frac{2 m_v^* k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \quad (\text{III-9})$$

E_F est le niveau de Fermi qui est l'énergie de référence pour laquelle la probabilité d'occupation $f(E_F)$ est égale à 0.5 ; m_c^* et m_v^* sont respectivement les masses effectives de l'électrons et du

trou ; E_c est le niveau du bas de la bande de conduction ; E_v est le niveau du haut de la bande de valence ; T est la température absolue du matériau (en K) ; k_B est la constante de Boltzmann et h , la constante de Planck ($\hbar=h/2\pi$).

III.2.1.1 Semi-conducteur intrinsèque

Un semi-conducteur est dit intrinsèque s'il est à l'état pur dépourvu de toute impureté pouvant modifier les densités des porteurs. Dans ce cas-là, les densités d'électrons et de trous sont égales et on peut écrire :

$$n = p = n_i \quad (\text{III-10})$$

et donc :

$$n p = n_i^2 \quad (\text{III-11})$$

En vertu des équations (III-4, III-8, III-11), on trouve le produit :

$$n p = N_c N_v \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T}\right) \quad (\text{III-12})$$

Par conséquent :

$$n_i = (N_c N_v)^{1/2} \exp\left(-\frac{E_g}{2 k_B T}\right) \quad (\text{III-13})$$

n_i est la densité intrinsèque des porteurs, c'est une caractéristique propre au semi-conducteur à une température donnée. La position du niveau de Fermi peut être repérée en écrivant : $n=p$, soit :

$$N_c \exp\left(\frac{E_f - E_c}{k_B T}\right) = N_v \exp\left(\frac{E_v - E_f}{k_B T}\right) \quad (\text{III-14})$$

Soit

$$E_{fi} = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln \frac{N_v}{N_c} \quad (\text{III-15})$$

En remplaçant N_v et N_c par leurs expressions, on trouve :

Soit
$$E_{fi} = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln \frac{m_v^*}{m_c^*} \quad (\text{III-16})$$

Puisque $m_c^* \simeq m_v^*$, on peut écrire :

$$E_{fi} \sim \frac{E_c + E_v}{2} \quad (\text{III-17})$$

Cette relation montre que le niveau de Fermi d'un semi-conducteur intrinsèque se trouve approximativement au milieu de la bande interdite (Figure III-1).

III.2.1.2 Semi-conducteur extrinsèque

Lorsqu'un semi-conducteur est dopé par des atomes spécifiques tel que le Bore (atome accepteur) ou le phosphore (atome donneur), ses propriétés électriques sont modifiées considérablement. On dit qu'un semi-conducteur extrinsèque est de type n si la densité la densité des donneurs (N_d) est supérieure à la densité des accepteurs (N_a), dans le cas inverse, le semi-conducteur est de type p. En se basant sur l'équation de neutralité et dans le cas où tous les atomes dopants sont ionisés, on a :

$$n + N_a = p + N_d \quad (\text{III-18})$$

En négligeant la densité des trous dans le cas d'un semi-conducteur de type n, la densité des électrons (ici porteurs majoritaires) est :

$$n = N_d - N_a \quad (\text{III-19})$$

En utilisant l'expression (III-11) on obtient la densité des trous (porteurs minoritaires) :

$$p = \frac{n_i^2}{N_d - N_a} \quad (\text{III-20})$$

En combinant les expressions (III-4, III-19), on obtient la position du niveau de Fermi :

$$E_F = E_c - k_B T \ln \frac{N_c}{N_d - N_a} \quad (\text{III-21})$$

On remarque que le niveau de Fermi est au-dessus du milieu de la bande interdite et tend vers le bas de la bande de conduction lorsque le dopage augmente (Figure III-1). Pour un semi-conducteur de type p et avec une procédure analogue, on obtient :

$$p = N_a - N_d \quad (\text{III-22})$$

$$n = \frac{n_i^2}{N_a - N_d} \quad (\text{III-23})$$

$$E_F = E_v + k_B T \ln \frac{N_v}{N_a - N_d} \quad (\text{III-24})$$

On remarque que le niveau de Fermi est au-dessous du milieu de la bande interdite et tend vers le haut de la bande de valence lorsque le dopage augmente (Figure III-1).

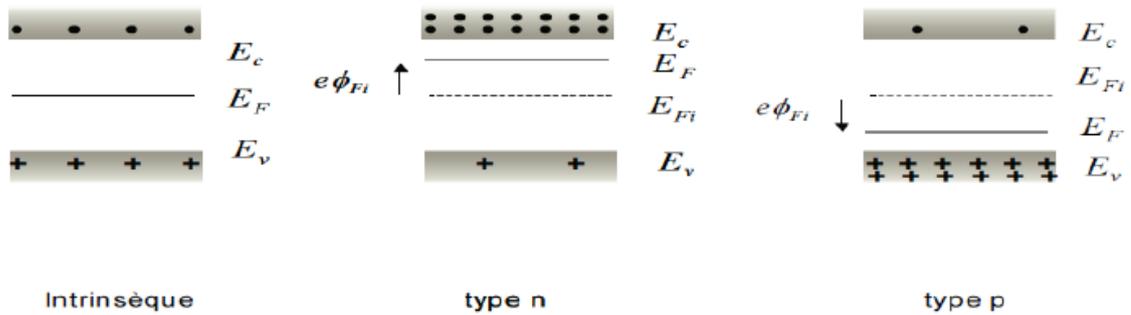


Figure III.1 : Les trois types de semi-conducteurs.

III.2.2 Semi-conducteur hors équilibre

III.2.2.1 Courants dans le semi-conducteur

Sous l'effet d'un champ électrique \vec{E} , il y a un déplacement des porteurs de charges, donc un courant de conduction \vec{J}_c donné par la loi d'ohm :

$$\vec{J}_c = \sigma \vec{E} \quad (\text{III-25})$$

Où σ est la conductivité du semi-conducteur. Pour les électrons :

$$\vec{J}_n = nq\mu_n \vec{E} \quad (\text{III-26})$$

CHAPITRE III Modèle semi-analytique du transport électronique dans les cellules solaires à puits quantiques

Avec μ_n , la mobilité des électrons; q , la valeur absolue de la charge d'électron. Et de façon similaire pour les trous :

$$\vec{J}_n = pq\mu_p \vec{E} \quad (\text{III-27})$$

Avec μ_p , la mobilité des trous. Ainsi le courant total de conduction :

$$\vec{J}_c = \vec{J}_n + \vec{J}_p \quad (\text{III-28})$$

En remplaçant les deux courants par leurs expressions respectives, on obtient le courant de conduction total :

$$\vec{J}_c = (n\mu_n + p\mu_p)\vec{E} \quad (\text{III-29})$$

Par ailleurs et sous l'effet d'un gradient de concentration, selon la loi de Fick, il y a existence d'un courant de diffusion \vec{J}_D

Pour les électrons :

$$\vec{J}_n = qD_n \vec{\nabla} n \quad (\text{III-30})$$

D_n est la constante de diffusion des électrons.

Pour les trous :

$$\vec{J}_p = -qD_p \vec{\nabla} p \quad (\text{III-31})$$

D_p est la constante de diffusion des trous.

Ainsi le courant total de diffusion s'écrit :

$$\vec{J}_D = q(D_n \vec{\nabla} n - D_p \vec{\nabla} p) \quad (\text{III-32})$$

D'après les expressions ci-dessus (II-26-27-30-31) les courants totaux des électrons et des trous s'écrivent donc :

$$\vec{J}_n = q(n\mu_n \vec{E} + D_n \vec{\nabla} n) \quad (\text{III-33})$$

$$\vec{J}_p = q(p\mu_p \vec{E} - D_p \vec{\nabla} p) \quad (\text{III-34})$$

III.3 Homojonction

L'homojonction est la structure la plus couramment utilisée. Elle est constituée principalement de la juxtaposition des deux régions, différemment dopées, d'un même semiconducteur monocristal [69]. Sous l'effet de gradient abrupt de concentration en impuretés, les électrons (porteur majoritaires de la région N), vont diffuser de la région N vers la région P où ils sont minoritaires. Il en est de même pour les trous qui diffusent de la région P vers la région N. L'équilibre thermodynamique est atteint dans la zone de charge d'espace (ZCE) quand les composants du courant de conduction liés au champ électrique compensent exactement les composants du courant de diffusion. Hors de la zone de charge d'espace, le champ électrique est nul et le niveau de Fermi est aligné. Le diagramme des bandes d'énergie de la jonction N/P à l'équilibre thermodynamique est représenté par la figure (III.2). La variation de l'énergie électrostatique dans la jonction N/P crée une barrière de potentiel. La hauteur de cette barrière, encore appelée tension de diffusion V_d , est calculé par la formule suivante [69,70] :

$$V_d = \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{N_A N_D}{n_i^2} \right) \quad \text{(III-35)}$$

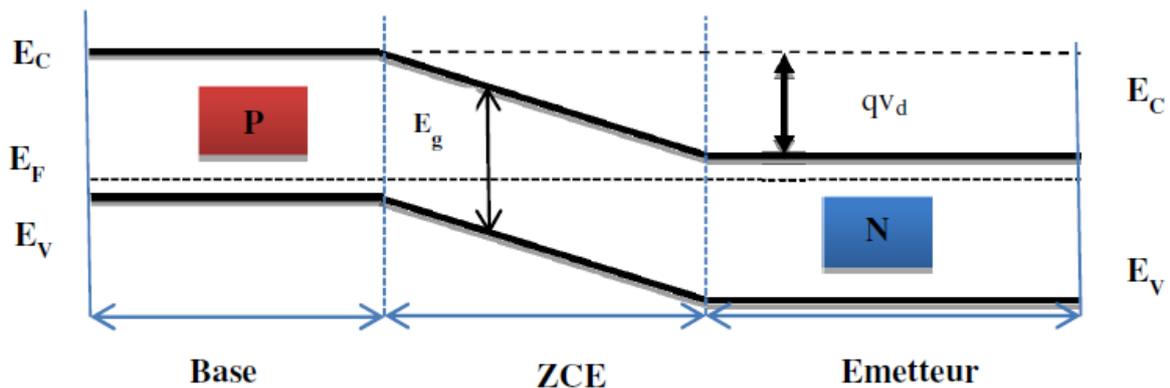


Figure III.2: Diagramme des bandes d'énergie d'une cellule solaire N/P à l'équilibre thermodynamique[70].

Lorsqu'un photon $h\nu$, supérieure à l'énergie de la bande interdite provenant d'une lumière monochromatique, est envoyé sur la face avant d'un matériau semiconducteur, des paire électron-trou seront créés. Le taux de génération des paires électron-trou $G(z, \lambda)$ à une distance z de la surface est donné par la relation (III-36) :

$$G(z, \lambda) = \alpha(\lambda)F(\lambda)[1 - R(\lambda)]\exp(-\alpha(\lambda)z) \quad (\text{III-36})$$

Où $\alpha(\lambda)$ est le coefficient d'absorption du matériau, $F(\lambda)$ le flux spectrale de photons incidents et $R(\lambda)$ est le coefficient de réflexion à la surface du matériau.

Une polarisation directe est appliquée à la jonction N/P. lors de l'éclairement de la cellule solaire, la hauteur de la barrière de potentiel interne est diminuée d'une valeur $V_d - V$ (ou V est la différence de potentiel aux bornes de la jonction à cause de l'éclairement). Le diagramme des bandes énergétiques de la jonction N/P sous l'éclairement est représenté par la figure (III.3) :

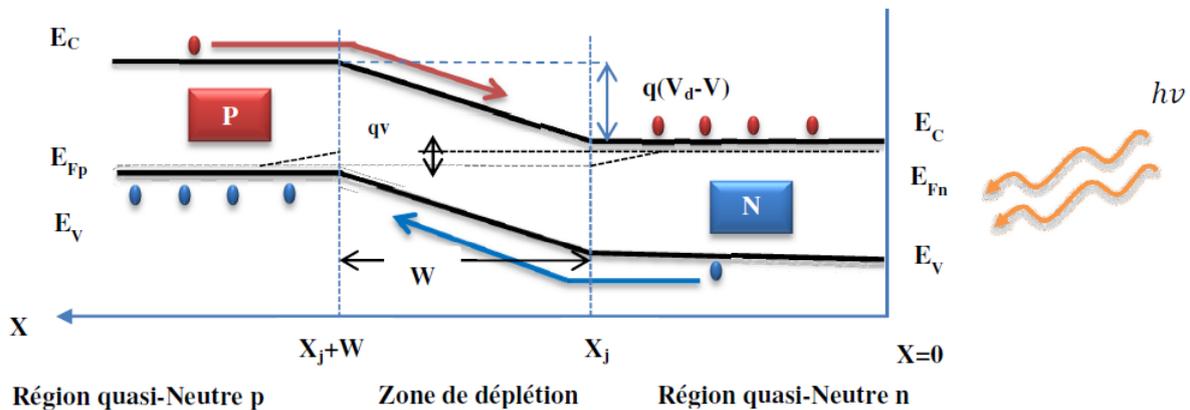


Figure III.3: Diagramme des bandes d'énergie d'une cellule solaire N/P sous l'éclairement (polarisation directe) [70].

III.4 Hétérojonction

Une hétérojonction est une jonction entre deux matériaux différents. Si les deux matériaux sont des semiconducteur, il s'agit d'une hétérojonction à semiconducteurs. Dans ce cas, la différence réside généralement dans la structure des bandes. La figure (III-4) donne le diagramme des bandes d'énergie d'une hétérojonction N/P à l'équilibre thermodynamique [71].

Lors de la mise en contact des deux semiconducteurs, les porteurs sont diffusés d'une region à l'autre de la jonction, de la même façon qu'une homojonction. à l'équilibre thermodinamique, le niveau de Fermi est unique le long de toute la cellule. Les photons ayant une énergie

inférieure à E_{g1} et supérieure à E_{g2} traversent le premier semiconducteur et sont absorbés par second.

Les hétérojonctions ont des performance meilleures que les homo-jonctions[72].

- Meilleure réponse spectrale et exploitation du maximum solaire.
- Amélioration de l'absorption des photons si le premier semiconducteurs est épais (absorption dans les deux semiconducteurs).
- Tension en circuit ouvert assez importante.

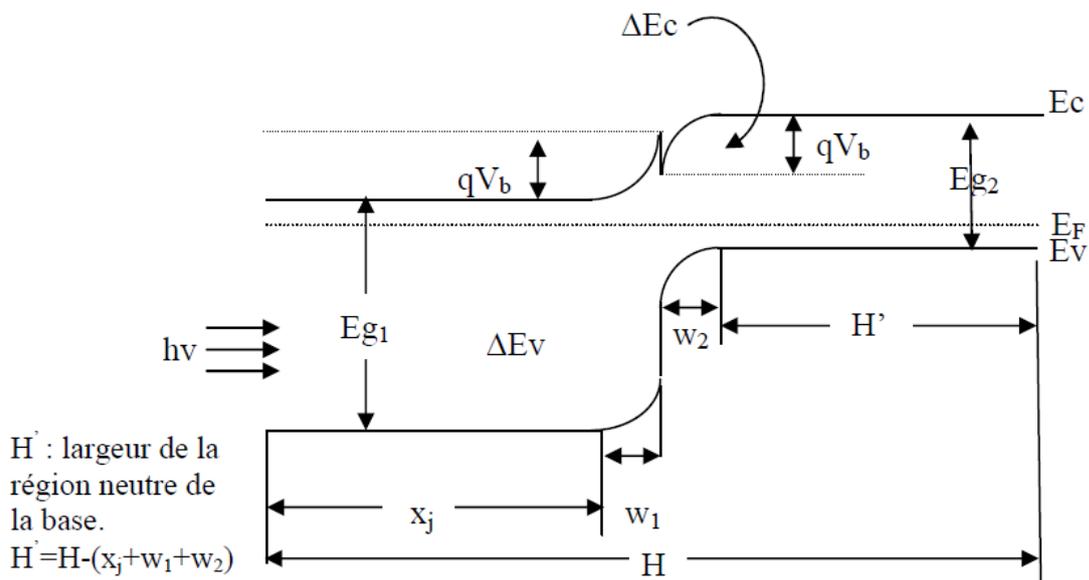


Figure III.4 : Diagramme des bandes d'énergie d'une hétérojonction N/P à l'équilibre thermodynamique [73].

Le problème essentiel dans l'étude des hétérojonctions est la détermination de la barrière de potentiel existant aux différentes interfaces. Cette barrière conditionne le passage d'un électron ou d'un trou d'un matériau à l'autre. En général, les discontinuités des bandes peuvent être spécifiées dans l'une des expressions de discontinuité pour la bande de conduction ou la bande de valence. La discontinuité de la bande de conduction est généralement la plus intéressante.

La règle la plus adoptée par la plus par des chercheurs et scientifiques, pour le calcul de cette discontinuité, est la règle d'affinité électronique ou modèle d'Anderson [69]. Elle impose que la discontinuité des bandes de conduction, à une hétérojonction abrupte, est simplement égale à la différence des affinités électroniques des deux semi-conducteurs :

$$\Delta E_C = E_{C2} - E_{C1} = \chi_1 - \chi_2 \quad (\text{III-37})$$

$$\Delta E_V = \Delta\chi + \Delta E_g \quad (\text{III-38})$$

Où χ_1 et χ_2 sont affinités électroniques des deux semi-conducteurs.

III.4.1 Photocourant

La contribution de la région de base au photocourant est plus importante que celle des autres régions. Pour une hétérojonction N/P avec la région de base neutre, le courant est exprimé par la relation (III-39) :

$$J_n = \frac{qF(\lambda)\exp[-\alpha_1(x_j+w_1)]\exp(-\alpha_2w_2)\alpha_2L_{n2}(1-R)}{(\alpha_2^2L_{n2}^2-1)} \times \left[\alpha_2L_{n2} - \frac{\left(\frac{S_nL_{n2}}{D_{n2}}\right)\left[\cosh\left(\frac{H'}{L_{n2}}\right) - \exp(-\alpha H')\right] + \sinh\left(\frac{H'}{L_{n2}}\right) + \alpha_2L_{n2}\exp(-\alpha H')}{\frac{S_nL_{n2}}{D_{n2}}\sinh\left(\frac{H'}{L_{n2}}\right) + \cosh\left(\frac{H'}{L_{n2}}\right)} \right] \quad (\text{III-39})$$

Le courant de la région d'émetteur est :

$$J_P = \frac{qF(\lambda)\alpha_1L_{P1}}{(\alpha_1^2L_{P1}^2-1)} (1-R) \times \left[\frac{\left(\frac{S_PL_{P2}}{D_{P2}} + \alpha_1L_{P1}\right) - \exp(-\alpha_1x_j)\left(\frac{S_PL_{P1}}{D_{P1}}\cosh\frac{x_j}{L_{P1}} + \sinh\frac{x_j}{L_{P1}}\right)}{\frac{S_PL_{P1}}{D_P}\sinh\left(\frac{x_j}{L_{P1}}\right) + \cosh\left(\frac{x_j}{L_{P1}}\right)} - \alpha_1L_{P1}\exp(-\alpha_1x_j) \right] \quad (\text{III-40})$$

Pour la basse. Avec :

α_1 et α_2 : Coefficients d'absorption des deux matériaux.

w_1 et w_2 : Largeurs des zones de déplétion dans les deux régions N et P.

La largeur de la zone de déplétion est donné par :

$$w_1 = \left[\left(\frac{2\varepsilon_1}{qN_1} \right) \left[\frac{\varepsilon_2 N_2}{\varepsilon_1 N_1 + \varepsilon_2 N_2} V_d \right] \right]^{1/2} \quad (\text{III-41})$$

$$w_2 = \left[\left(\frac{2\varepsilon_2}{qN_2} \right) \left[\frac{\varepsilon_1 N_1}{\varepsilon_1 N_1 + \varepsilon_2 N_2} V_d \right] \right]^{1/2} \quad (\text{III-42})$$

Pour une hétérojonction N/P :

$$V_d = E_{g2} + \Delta E_c - (E_c - E_F) - (E_F - E_V) \quad (\text{III-43})$$

Où : $(E_c - E_F)$ et $(E_F - E_V)$ représente la différence d'énergie, entre le niveau de Fermi et la bande de conduction ainsi qu'entre le niveau de Fermi et la bande de valence.

Dans le cas hétérojonction P/N :

$$V_d = E_{g2} + \Delta E_V - (E_c - E_F) - (E_F - E_V) \quad (\text{III-44})$$

ΔE_c et ΔE_V sont données par les équations III-37 et III-38.

Les photocourants des régions de déplétion sont données par :

$$J_{w1}(\lambda) = qF(1 - R)\exp(-\alpha_1 x_j)[1 - \exp(-\alpha_1 w_1)] \quad (\text{III-45})$$

$$J_{w2}(\lambda) = qF(1 - R)\exp(-\alpha_1(x_j + w_1))[1 - \exp(-\alpha_2 w_2)] \quad (\text{III-46})$$

Où la réflexion est négligée aux l'interfaces dans l'équation.

$$J_w(\lambda) = J_{w1}(\lambda) + J_{w2}(\lambda) \quad (\text{III-47})$$

Les expressions ci-dessus ont été obtenues avec les hypothèses suivantes :

- Les discontinuités ΔE_c et ΔE_V sont faibles.
- Les minoritaires dans le matériau du bas ne seront pas freinés au cours de leur mouvement à travers la jonction.

- Ecart très faible entre les paramètres des mailles des deux semi-conducteur, de telle sorte que la recombinaison à l'interface devient négligeable.

La longueur d'onde de coupure est donnée par le gap du deuxième matériau E_{g2} . La réponse spectrale aux courtes longueurs d'onde dépend d' E_g et de l'épaisseur du semi-conducteur du haut.

III.4.2 Courant d'éclairement pour une lumière monochromatique dans une cellule solaire à puits quantique (MQW) :

La méthodologie donnant le photocourant suit la méthode standard décrite par Hovel en 1975 [73]. Lorsque le dopage est uniforme dans les régions neutres, le champ électrique devient nul le long de ces régions (hors la zone de charge d'espace). La figure (III-5) donne le diagramme des bandes d'énergie d'une cellule solaire multi puits quantique p-i(MQW)-n à l'équilibre thermodynamique. Dans les régions neutres, la réponse spectrale est calculée en fonction de la longueur d'onde en résolvant les équations de transport et les équations de continuité.

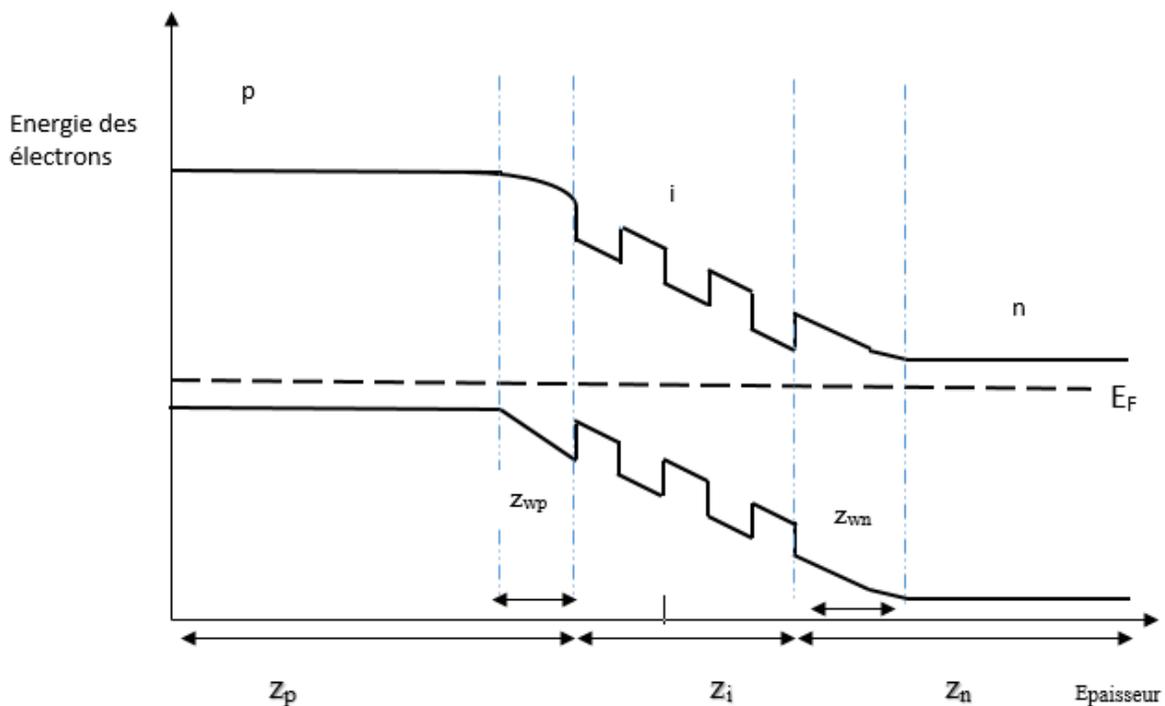


Figure III.5 : Diagramme des bandes d'énergie d'une cellule solaire p-i(MQW)-n à l'équilibre thermodynamique [74].

Lorsqu'une lumière monochromatique de longueur d'onde λ arrive sur la surface d'un matériau semi-conducteur des porteurs seront créés sous l'effet des photons et devenus libres contribuent au photo-courant. Le taux de génération des paires électron-trou $G(z, \lambda)$ à une distance z de la surface est donné par la relation (III-48) :

$$G(z, \lambda) = \alpha(\lambda)F(\lambda)[1 - R(\lambda)]\exp(-\alpha(\lambda)z) \quad (\text{III-48})$$

À partir des équations de continuité, en écrit, pour les trous dans le semi-conducteur de type N :

$$(1/q)(dJ_p/dz) - G_p + \frac{P_n - P_{n0}}{\tau_p} = 0 \quad (\text{III-49})$$

Dans le cas d'un matériau de type P, les minoritaires sont des électrons, l'équation de continuité s'écrit :

$$(1/q)(dJ_n/dz) + G_n - \frac{n_p - n_{p0}}{\tau_n} = 0 \quad (\text{III-50})$$

Où J_p , J_n , G_p , G_n , τ_p , τ_n sont les densités de courants, le taux de génération et durées de vie des trous et des électrons respectivement ; p_n , n_p les densités des porteurs minoritaires générées par la lumière, et n_{p0} , p_{n0} densités des porteurs minoritaires à l'équilibre, q la charge de l'électron. Les équations de transport nous permettent d'obtenir les densités de courants des trous et des électrons, comme suit :

$$J_p = q\mu_p p_n E - qD_p(dp_n/dz) \quad (\text{III-51})$$

$$J_n = q\mu_n n_p E + qD_n(dn_p/dz) \quad (\text{III-52})$$

E : le champ électrique, les mobilités et les coefficients de diffusion des trous et des électrons sont respectivement : μ_p , μ_n , D_p , D_n .

III.4.2.1 Courant dans la région quasi-neutre P

Lorsque le dopage est uniforme dans les régions neutres, le champ électronique devient nul le long de ces régions (hors la zone de charge d'espace).

CHAPITRE III Modèle semi-analytique du transport électronique dans les cellules solaires à puits quantiques

Dans le cas d'une cellule p-i(MQW)-n, ou l'émetteur est de type N, et la base de type P, la combinaison des équations (III-48)-(III-50) et (III-52) permet de donner l'expression qui traduit les phénomènes de la région de base :

$$D_n \frac{d^2(n_p - n_{p0})}{dz^2} + \alpha F(1 - R) \exp(-\alpha z) - \frac{n_p - n_{p0}}{\tau_n} = 0 \quad (\text{III-53})$$

La solution générale de cette équation est :

$$n_p - n_{p0} = A \cosh(z/L_n) + B \sinh(z/L_n) - \frac{\alpha F(1 - R)\tau_n}{(\alpha^2 L_n^2 - 1)} \exp(-\alpha z) \quad (\text{III-54})$$

où L_n est la longueur de diffusion des électrons, $L_n = (D_n \tau_n)^{1/2}$. Avec les conditions aux limites, on peut trouver les deux constantes A, B.

- ✓ A la surface, une recombinaison se produit avec une vitesse S_n :

$$D_n \frac{d(n_p - n_{p0})}{dz} = S_n(n_p - n_{p0}), \quad \text{à } (z = 0) \quad (\text{III-55})$$

- ✓ A la limite de la jonction, la densité des porteurs en excès est réduite à zéro par le champ électronique dans la zone de déplétion :

$$n_p - n_{p0} = 0, \quad \text{avec } z = z_p - z_{wp} \quad (\text{III-56})$$

On pose

$$z_j = z_p - z_{wp}$$

A partir de ces conditions aux limites, nous obtenons les expressions de A et B, puis nous les remplaçons dans l'équation (III-54) :

$$n_p - n_{p0} = [\alpha F(1 - R)\tau_n / (\alpha^2 L_n^2 - 1)] \times \left[\frac{\left(\frac{S_n L_n}{D_n} + \alpha L_n \right) \sinh\left(\frac{z_j - z}{L_n}\right) + \exp(-\alpha z_j) \left(\frac{S_n L_n}{D_n} \sinh\left(\frac{z}{L_n}\right) + \cosh\left(\frac{z}{L_n}\right) \right)}{\left(\frac{S_n L_n}{D_n} \sinh\left(\frac{z_j}{L_n}\right) + \cosh\left(\frac{z_j}{L_n}\right) \right)} - \exp(-\alpha z) \right] \quad (\text{III-57})$$

et la densité du photocourant des électrons à la zone de base est :

$$J_n = q D_e \left. \frac{d\Delta n}{dz} \right|_{z_j} \quad (\text{III-58})$$

$$J_n = [qF(1 - R)\alpha L_n / (\alpha^2 L_n^2 - 1)] \times \left[\frac{\left(\frac{S_n L_n}{D_n} + \alpha L_n \right) - \exp(-\alpha z_j) \left(\frac{S_n L_n}{D_n} \cosh\left(\frac{z_j}{L_n}\right) + \sinh\left(\frac{z_j}{L_n}\right) \right)}{\left(\frac{S_n L_n}{D_n} \sinh\left(\frac{z_j}{L_n}\right) + \cosh\left(\frac{z_j}{L_n}\right) \right)} - \alpha L_n \exp(-\alpha z_j) \right]$$

Et efficacité quantique des électrons à la zone de base est :

$$QE_p = [(1 - R)\alpha L_n / (\alpha^2 L_n^2 - 1)] \times \left[\frac{\left(\frac{S_n L_n}{D_n} + \alpha L_n \right) - \exp(-\alpha z_j) \left(\frac{S_n L_n}{D_n} \cosh\left(\frac{z_j}{L_n}\right) + \sinh\left(\frac{z_j}{L_n}\right) \right)}{\left(\frac{S_n L_n}{D_n} \sinh\left(\frac{z_j}{L_n}\right) + \cosh\left(\frac{z_j}{L_n}\right) \right)} - \alpha L_n \exp(-\alpha z_j) \right] \quad (\text{III-59})$$

III.4.2.2 Courant dans la région quasi-neutre N

Pour trouver le photocourant des trous générés dans l'émetteur, les équations (III-48)-(III-49) et (III-51) sont nécessaires avec les conditions aux limites suivantes :

De même que la région de base, au bord de la zone de déplétion, la densité des porteurs minoritaires en excès est nulle :

$$p_n - p_{n0} = 0, \quad \text{à } (z = z_p + z_i + z_{wn}) \quad (\text{III-60})$$

A la surface arrière de la cellule une recombinaison en surface prend place S_p , notons que la de recombinaison au contact arrière est très élevée.

$$-D_p \frac{d(p_n - p_{n0})}{dz} = S_p (p_n - p_{n0}), \quad \text{à } (z = z_p + z_i + z_n) \quad (\text{III-61})$$

$$H = z_p + z_i + z_n$$

$$H' = z_n - z_{wn}$$

CHAPITRE III Modèle semi-analytique du transport électronique dans les cellules solaires à puits quantiques

En exploitant ces conditions aux limites, et avec l'utilisation d'une expression des trous similaire à celle des électrons (III-53), on déduit alors la distribution des électrons dans la région d'émetteur :

$$\begin{aligned}
 p_n - p_{n0} = & [\alpha F(1 - R)\tau_p / (\alpha^2 L_p^2 - 1)] \exp[-\alpha(z_p + z_i + z_{wn})] \times \\
 & \left[\cosh\left(\frac{z - (z_p + z_i + z_{wn})}{L_p}\right) - \exp[-\alpha(z_p + z_i + z_{wn})] - \right. \\
 & \frac{\left(\frac{S_p L_p}{D_p}\right) \left[\cosh\left(\frac{H'}{L_p}\right) - \exp(-\alpha H') \right] + \sinh\left(\frac{H'}{L_p}\right) + \alpha L_p \exp(-\alpha H')}{\frac{S_p L_p}{D_p} \sinh\left(\frac{H'}{L_p}\right) + \cosh\left(\frac{H'}{L_p}\right)} \times \\
 & \left. \sinh\left(\frac{z - (z_p + z_i + z_{wn})}{L_p}\right) \right]
 \end{aligned} \tag{III-62}$$

La densité de photocourant issue de l'émetteur due aux trous collectées à la limite de la jonction est :

$$\begin{aligned}
 J_p &= [qF(1 - R)\alpha L_p / (\alpha^2 L_p^2 - 1)] \exp[-\alpha(z_p + z_i + z_{wn})] \\
 &\times \left[\alpha L_p - \frac{\left(\frac{S_p L_p}{D_p}\right) \left[\cosh\left(\frac{H'}{L_p}\right) - \exp(-\alpha H') \right] + \sinh\left(\frac{H'}{L_p}\right) + \alpha L_p \exp(-\alpha H')}{\frac{S_p L_p}{D_p} \sinh\left(\frac{H'}{L_p}\right) + \cosh\left(\frac{H'}{L_p}\right)} \right]
 \end{aligned} \tag{III-63}$$

Et efficacité quantique des trous à la zone de l'émetteur est :

$$\begin{aligned}
 QE_n &= [(1 - R)\alpha L_p / (\alpha^2 L_p^2 - 1)] \exp[-\alpha(z_p + z_i + z_{wn})] \\
 &\times \left[\alpha L_p \right. \\
 &\quad \left. - \frac{\left(\frac{S_p L_p}{D_p}\right) \left[\cosh\left(\frac{H'}{L_p}\right) - \exp(-\alpha H') \right] + \sinh\left(\frac{H'}{L_p}\right) + \alpha L_p \exp(-\alpha H')}{\frac{S_p L_p}{D_p} \sinh\left(\frac{H'}{L_p}\right) + \cosh\left(\frac{H'}{L_p}\right)} \right] \quad (\text{III-64})
 \end{aligned}$$

III.4.2.3 Courant dans la région de charge d'espace

La génération dans la zone de charge d'espace représente le siège principal du courant. Le champ électrique dans cette zone est assez élevé, les porteurs créés sont accélérés en dehors de cette zone avant de se recombiner. La densité du courant produite dans cette zone est égale au nombre de photons absorbés :

$$J_{dr} = qF(1 - R)\exp(-\alpha z_j)[1 - \exp(-\alpha w)] \quad (\text{III-65})$$

III.4.2.4 Photocourant total

La somme des trois composants calculés ci-dessus permet d'obtenir la densité totale du courant d'éclairement en court-circuit, en fonction de la longueur d'onde du rayonnement incident, donc :

$$J(\lambda) = J_p(\lambda) + J_n(\lambda) + J_{dr}(\lambda) \quad (\text{III-66})$$

III.5 Facteurs influents sur les performances de la cellule solaire :

III.5.1 Passivation des faces avant et arrière de la cellule

La surface des semi-conducteurs contient une densité importante des défauts, entraîne des pertes non négligeables, liées à la recombinaison en surface. La passivation consiste à améliorer la qualité électronique de la surface, en neutralisant les effets de ses défauts électriquement actifs. Diverses couches de passivation sont utilisées en photovoltaïque, dont les plus importantes sont l'oxyde thermique de silicium (SiO₂) et le nitrite de silicium SiN₃. Une cellule

solaire de haute qualité nécessite une meilleure passivation de la surface semi-conductrice avec forte qualité des matériaux d'électroniques.

III.5.2 Couche antireflet :

La surface de la cellule solaire est le siège d'une forte quantité de pertes par réflexion : 34% des pertes sont localisées dans la surface d'une cellule en Si dans la grandes longueurs d'onde (1.1µm) et plus de 54% aux courtes longueurs d'onde (0.4µm)[75]. L'une des méthodes utilisées dans la conception des cellules solaires pour minimiser ce types de pertes est l'utilisation de couches antireflet(CAR, Anti-Reflective Coatings) ou bien la texturisation de la surface.

Le tableau suivant, des matériaux couramment utilisés pour le revêtement antireflet [76] :

Tableau III.1 : Matériaux utilisées par le revêtement antireflet.

Matériaux	n
MgF₂	1.38
SiO₂	1.46
Al₂O₃	1.76
Si₃N₄	2.05
Ta₂O₅	2.2
ZnS	2.36
SiO_x	1.8-1.9

La CAR est un revêtement diélectrique mince avec une très faible valeur d'indice de réfraction est basé sur l'interférence des faisceaux lumineux. Pour une incidence normale de la lumière sur une surface plane et lisse, l'épaisseur de la couche antireflet est choisie de sorte que la longueur d'onde dans le matériau diélectrique soit égale au quart de longueur d'onde incidente .

La réflexion de la lumière incidente, de longueur d'onde λ , sur la surface d'un cellule solaire à mutipuits quantique couvert d'une seule couche antireflet d'épaisseur (d) est donné par[77-79] :

$$R = \frac{r_1^2 + r_2^2 + 2r_1r_2 \cos 2\theta}{1 + r_1^2r_2^2 + 2r_1r_2 \cos 2\theta} \quad \text{(III-67)}$$

ou r_1 et r_2 sont la réflectance sur les surfaces (air-CAR) et (CAR-cellule solaire à mutipuits quantique).

$$r_1 = \frac{n_0 - n_1}{n_0 + n_1} \quad (\text{III-68})$$

$$r_2 = \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \quad (\text{III-69})$$

L'angle θ est donné par :

$$\theta = \frac{2\pi n_1 d}{\lambda} \quad (\text{III-70})$$

n_0, n_1 et n_2 sont respectivement les indices de réfraction de l'air, de la couche antireflet (CAR) et de cellule solaire à mutipuits quantique[80].

ou

$$n_{GaAs} = \begin{cases} \frac{3.24123 - (4.8304085/\lambda) + (2.82482/\lambda^2) - (0.769037/\lambda^3) + (0.08198/\lambda^4)}{1 - (1.5308/\lambda) + (0.9123972/\lambda^2) - (0.2508648/\lambda^3) + (0.026769/\lambda^4)}, & \text{if } 0.325 < \lambda \leq 4, \\ \frac{2.8434068 - (1.8916996/\lambda) + (0.4189801/\lambda^2) - (0.0308637/\lambda^3)}{1 - (0.682372/\lambda) + (0.154593/\lambda^2) - (0.01159/\lambda^3)}, & \text{if } 0.2 \leq \lambda \leq 0.325 \end{cases} \quad (\text{III-71})$$

et

l'indice de refraction d'alliage trinaire $Al_xGa_{1-x}As$ est calculé par l'utilisation de la relation suivante [81] :

$$n_{Al_xGa_{1-x}As} = [1.05 - 0.53x + 0.09x^2]\lambda, \text{ avec } \lambda(\mu m) \quad (\text{III-72})$$

Beaucoup des modèles donnant l'indice de réfraction des matériaux III- V ont été entrepris par plusieurs chercheurs [77-79], en plus aux modèles établis, on prit en considération le phénomène de biréfringence et la variation de ce dernier en fonction de la fréquence.

CHAPITRE III Modèle semi-analytique du transport électronique dans les cellules solaires à puits quantiques

Un modèle connu ce le nom " Single Efficace Oscillator (SEO)". Récemment, une modification a été apportée au SE0. Un nouveau modèle donc a été adopté [82], et donc lequel l'indice de réfraction est donné par l'équation :

$$n^2 = 1 + \frac{E_d}{E_0} + \frac{E_d}{E_0^3} E^2 + \frac{\eta}{\pi} E^4 \ln \left(\frac{2E_0^2 - E_g^2 - E^2}{E_g^2 - E^2} \right), \quad (\text{III-73})$$

$$E_0 = A + BE_\Gamma,$$

où E_Γ est le bas de la band interdit, $A \approx 2.6$ et $B \approx 0.75$.

$$E_d = \frac{F}{E_0},$$

Ou F est lié à la stabilité de l'oscillateur et à la fréquence du plasma.

Tableau III.2 : Paramètres E_0 , E_d , E_g de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ [83].

E_0	$2.6+0.75E_g$
E_d	F/ E_0
E_g	$1.519 + 1.247x - \frac{dT^2}{T + 204}$ $d = 5.4 \cdot 10^{-4} eV/k$

La figure (III-6) présente l'indice de réfraction d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ en fonction de la longueur d'onde calculée à partir de l'équation (III-73) :

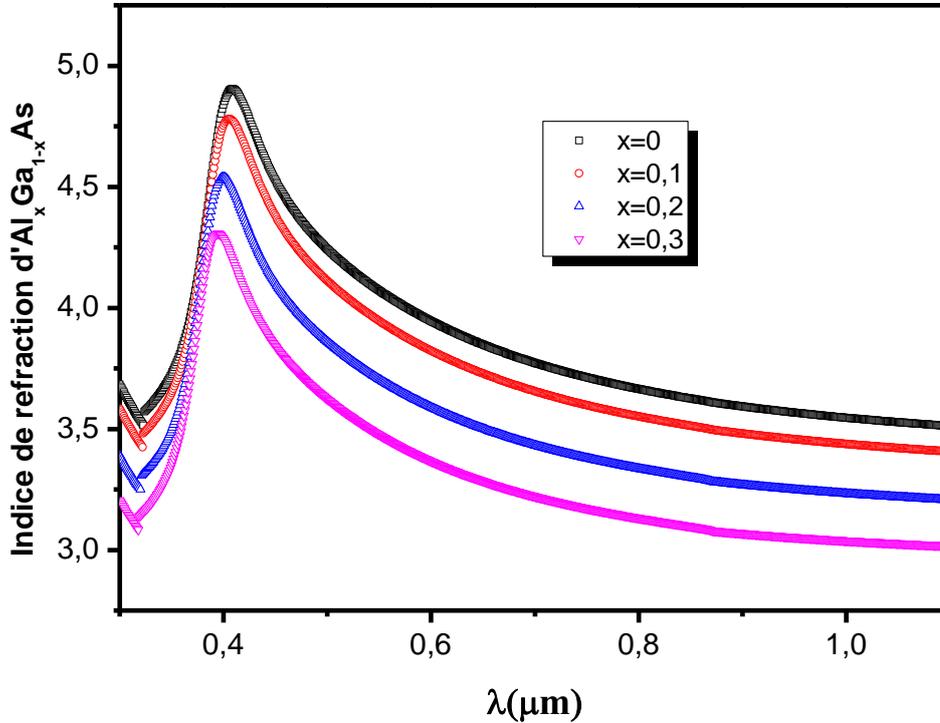


Figure III.6 : Indice de réfraction d'Al_xGa_{1-x}As en fonction de la longueur d'onde.

III.5.3 Modélisation et simulation de coefficient d'absorption

Dans les applications liées au calcul de l'efficacité de conversion des cellules solaires, mais aussi dans d'autres applications, le coefficient d'absorption est pratiquement décrit par des fonctions continues. Pour GaAs, à partir des résultats expérimentaux [84] a été déterminée par la fonction suivante qui se rapproche du taux d'absorption acceptable :

$$\alpha_{GaAs}(\lambda) = \begin{cases} e^{F_1(\lambda)}, & 0.7 < \lambda \leq 0.88, \\ e^{F_2(\lambda)}, & 0.24 < \lambda \leq 0.7, \\ e^{F_2(\lambda)}, & 0 < \lambda \leq 0.24, \\ 0, & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (\text{III-74})$$

$$F_1(\lambda) = -0.7863 + 5.3115 \left[1 + \operatorname{erf} \left(-\frac{\lambda - 0.84291}{0.038} \right) \right], \quad (\text{III-75})$$

$$F_2(\lambda) = -447.432 + 4201.2\lambda + 6835.128\lambda^2 \ln\lambda - 3781.193\lambda^3 + \frac{3.9049}{\lambda^2} \quad (\text{III-76})$$

Le coefficient d'absorption $\alpha_x(\lambda)$ d'alliage AlGaAs est générée à partir du coefficient d'absorption du GaAs :

$$\alpha_x(\lambda) = \alpha_0(\lambda_x) \quad (\text{III-77})$$

Où h est constant de Planck, c'est la vitesse ce la lumière, a=0.62 et b=0.5) [86].

$$\lambda_x = \frac{hc}{(hc/\lambda) - E_g(x) + E_g(0) + a[(hc/\lambda) - E_g(0)]^b} x \quad (\text{III-78})$$

Les figures (III-7-8) représentent le coefficient d'absorption des alliages AlGaAs et d'une cellule solaire MQW en fonction de la longueur d'onde.

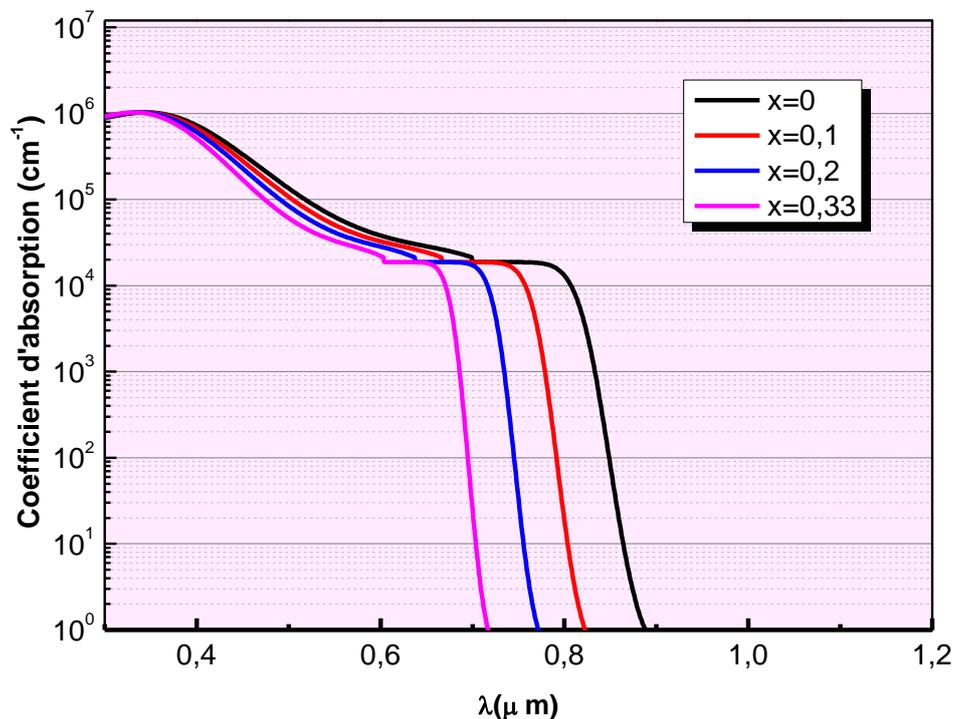


Figure III.7 : Coefficient d'absorption d'Al_xGa_{1-x}As en fonction de la longueur d'onde,

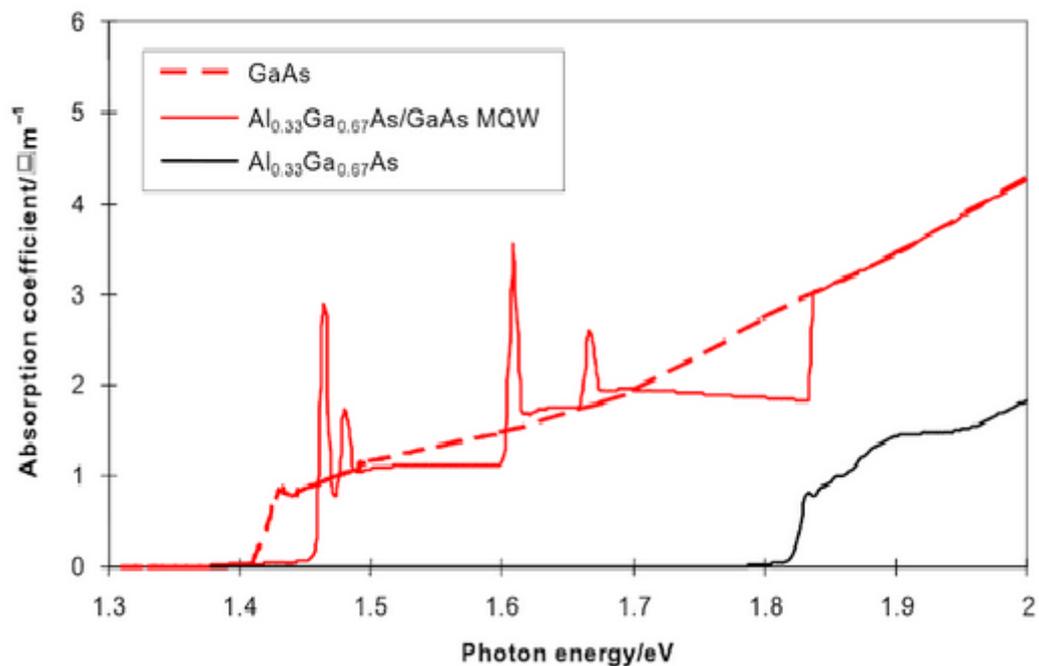


Figure III. 8 : Coefficient d'absorption d'une cellule solaire MQW [85].

III.6 Méthodes numériques

Les modèles mathématiques des sciences et des techniques se présentent très souvent sous la forme de systèmes d'équations différentielles qui lient des fonctions inconnues à leurs dérivées partielles. Des conditions initiales et des conditions limites sont en général requises pour compléter le modèle. Par exemple, la loi physique de la conservation de l'énergie peut s'exprimer comme une équation différentielle de la température, fonction de la position et du temps. Pour tirer une information pertinente sur le processus physique modélisé, il est essentiel de trouver la fonction satisfaisant l'équation différentielle et les conditions aux limites. Il s'agit donc de résoudre un problème différentiel aux conditions aux limites.

Ce chapitre contient des équations de ce type de problème dont la solution peut parfois être obtenue analytiquement. Toutefois, dans la plupart des cas, cela n'est pas possible et l'unique possibilité est de calculer une fonction approchée au moyen de méthodes numériques. L'idée de base consiste à ne rechercher que la valeur des fonctions inconnues en un grand nombre de points : il s'agit de la discrétisation. Au lieu de résoudre un problème différentiel ou problème continu, on résout un grand système algébrique qu'on appelle le problème discret. Evidemment,

les problèmes discrets dérivés de la modélisation physique se caractérisent par leur très grande taille et on n'a pu envisager leur résolution qu'avec les progrès récents de l'informatique.

Comment obtenir un problème discret ? C'est le rôle d'une méthode numérique telle que la méthode de différences finis MDF [87], la méthode d'éléments finis MEF [88-89], et les volumes finis MVF [90-91], qui sont à la base de nombreux logiciels utilisés pour la simulation. Nous avons adopté la MVF, puisque qu'elle est facile à concevoir contrairement à la MEF et à implémenter surtout avec des géométries présentant la variation de quelques paramètres physiques à savoir la permittivité et la masse effectives. L'objet de ce chapitre est de présenter cette méthode des Volume finis de chacune des équations étudiées, et les méthodes de résolution et le processus de couplage entre ces équations.

III.6.1 Méthode des Différences Finis (MDF)

La méthode des différences finies, présente une technique de résolution des équations aux dérivées partielles, par l'approximation de dérivées par des différences finies. Cette méthode consiste à subdiviser le domaine d'étude en un nombre déterminé de nœuds et à représenter la fonction recherchée en chacun des nœuds du domaine par un développement limité en série de Taylor. Ainsi, l'équation différentielle est transformée en équation algébrique pour chaque nœud. La résolution du système d'équations algébriques permet d'obtenir la distribution de la fonction étudiée dans le domaine d'étude.

La méthode de différence finie ne permet pas la prise en compte des conditions de passage d'un milieu physique à un autre et des non-linéarités, cela nécessite un traitement spécifique. D'autre part, elle s'adapte mal aux objets de la géométrie complexe à cause de la rigidité du maillage.

III.6.2 Méthode des Eléments Finis (MEF)

Cette méthode consiste à transformer les équations différentielles sous des formes intégrales basées sur le concept de minimisation d'une quantité (comme l'énergie...), conduisant à la solution exacte. En d'autre terme elle s'agisse de trouver une fonction globale représentant le modèle mathématique dans le domaine étudié.

Le principe fondamental de la méthode des éléments finis consiste à [92] :

- Définir une partition du domaine d'étude c'est-à-dire subdivisé le domaine d'étude en régions élémentaires (Eléments Finis).
- Représenter la fonction inconnue sur chacun de ces éléments par une approximation polynomiale.
- Construire les formes intégrales.
- Minimiser l'intégrale.
- Une organisation matricielle des calculs.
- Une résolution du système algébrique.

La MEF est une méthode très puissante pour la résolution des équations aux dérivées partielles surtout dans les géométries complexes. Sa mise en œuvre par contre, est assez compliquée et nécessite une place mémoire assez compliquée et nécessite une place mémoire assez importante.

III.6.3 Méthode des Volumes Finis (MVF)

La méthode des volumes finis est une version spéciale de la méthode des résidus pondérés où la fonction de projection égale à l'unité [93]. Cette méthode consiste à subdiviser le domaine d'étude en volumes élémentaires de telle manière que chaque volume entoure un nœud principal P. Chaque volume est délimité par : deux interfaces dans le cas unidimensionnel noté (e, w), quatre interfaces dans le cas bidimensionnel (e, w, s, n) et six interfaces dans le cas tridimensionnel (e, w, s, n, t, b). Chaque nœud principal P est limité par des nœuds voisins (E, W) dans le cas unidimensionnel, (E, W, S, N) dans le cas bidimensionnel, et (E, W, S, N, T, B) dans le cas tridimensionnel. L'équation différentielle est intégrée dans chaque volume élémentaire finis. Pour calculer l'intégrale dans ce volume élémentaire l'inconnue est représentée à l'aide d'une fonction d'approximation (linéaire, parabolique, exponentielle, de puissance etc.) entre deux nœuds consécutifs. Ensuite, la forme intégrale est discrétisée dans le domaine d'étude. Le résultat de discrétisation donne une équation algébrique qui est constituée par les valeurs nodales [90].

III.7 Méthodes numériques de discrétisation

La première étape de la solution numérique de ce système d'équations de la cellule solaire est la discrétisation du dispositif, dans le temps et dans l'espace. La structure est divisée spatialement en un ensemble fini de (VF_i) volumes le long de l'axe "z", qui suit

approximativement la direction du flux de courant dans le dispositif. Les méthodes numériques de discrétisation citées précédemment consistent à ramener la résolution du système d'équations différentielles dans le domaine d'étude, avec des conditions aux limites appropriés, à celles d'un système d'équations algébriques dont la solution donne l'énergie potentielle et le courant...etc.

III.7.1 Méthode des Volumes Finis dans le cas unidimensionnel

III.7.1.1 Formulation unidimensionnelle de l'équation de Poisson

Considérons l'équation de Poisson dans le cas unidimensionnel

$$\frac{d}{dz} \left(\varepsilon \frac{d\phi}{dz} \right) + \rho = 0 \tag{III-79}$$

Le domaine d'étude est subdivisé en un nombre fini de nœuds. Chaque volume fini entoure un nœud principal "P". Les nœuds voisins sont "E" côté Est et "W" côté West. Les lignes en tirés représentent les faces du volume fini coté Est (e) et coté West (w) figure (III.9).

Pour un problème unidimensionnel, le volume d'un volume fini est ΔZ .1.1.

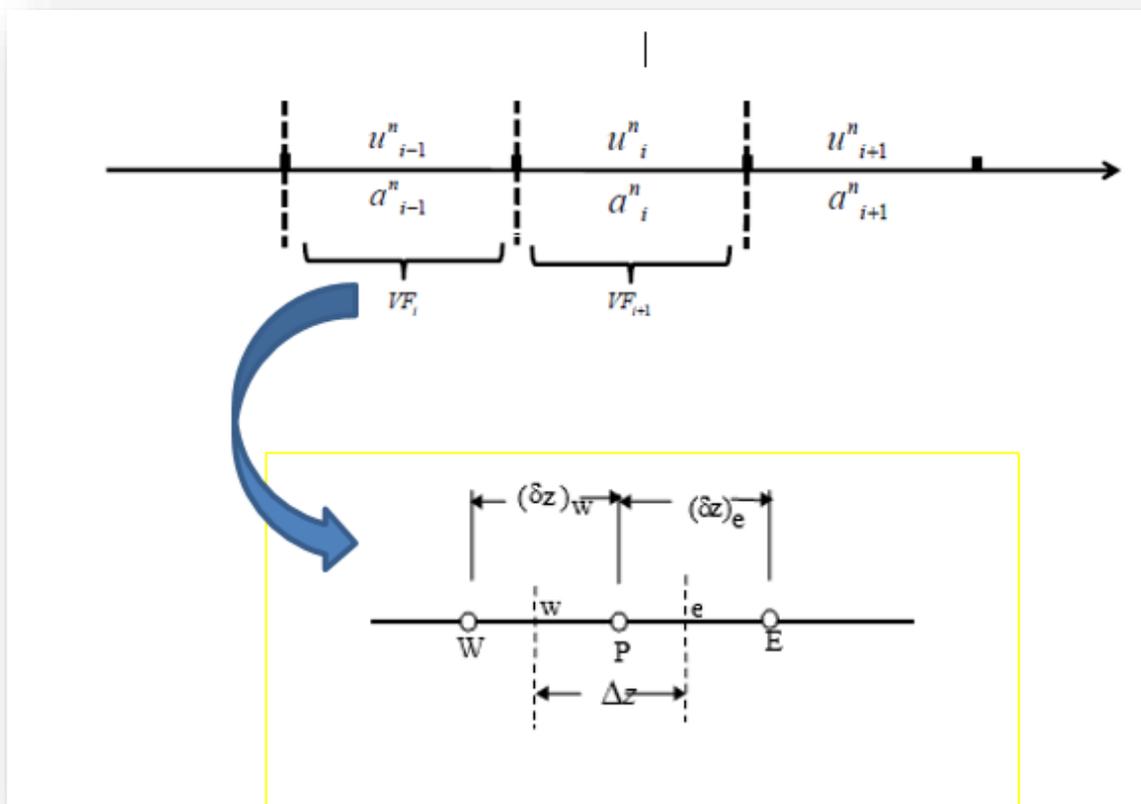


Figure III. 9 : Contrôle volume finis unidimensionnel.

CHAPITRE III Modèle semi-analytique du transport électronique dans les cellules solaires à puits quantiques

Représentation schématique les faces du volume fini coté Est (e) et coté West (w) l'équation (III-79) est intégrées sur le volume finis limité par les faces (w, e)

$$\int_w^e \frac{d}{dz} \left(\varepsilon \frac{d\phi}{dz} \right) dz + \int_w^e \rho dz = 0 \quad (\text{III-80})$$

Après intégration on aura :

$$\left(\varepsilon \frac{d\phi}{dz} \right)_e - \left(\varepsilon \frac{d\phi}{dz} \right)_w + \int_w^e \rho dz = 0 \quad (\text{III-81})$$

Un profil linéaire a été choisi pour exprimer la variation du potentiel ϕ entre les nœuds voisins :

$$\left[\varepsilon_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{(\delta z)_e} \right) - \varepsilon_w \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{(\delta z)_w} \right) \right] + \rho_P \Delta z = 0 \quad (\text{III-82})$$

Tels que :

ϕ_P : Potentiel électrique au nœud P,

ϕ_E : Potentiel électrique au nœud E,

ϕ_W : Potentiel électrique au nœud W,

$(\delta z)_e$: Distance entre les nœuds P et E,

$(\delta z)_w$: Distance entre les nœuds W et P,

Δz : Longueur de volume fini,

Ainsi l'équation algébrique finale s'écrit sous la forme :

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + S \quad (\text{III-83})$$

Avec :

$$a_E = \frac{\varepsilon_e}{(\delta z)_e}$$

$$a_W = \frac{\varepsilon_e}{(\delta z)_w}$$

$$a_P = a_E + a_W$$

$$S = \rho_P \Delta z$$

Dans le cas d'un maillage uniforme :

$$\Delta z = (\delta z)_e = (\delta z)_w$$

Alors on aura :

$$a_E = \frac{\varepsilon_e}{\Delta z}$$

$$a_W = \frac{\varepsilon_e}{\Delta z}$$

On peut écrire cette équation sous la forme suivante :

$$a_i \phi_i = b_i \phi_{i+1} + c_i \phi_{i-1} + d_i$$

Ainsi, on obtient une équation algébrique qui relie chaque nœud principal "P" avec les nœuds voisins "E" et "W". Si la discrétisation du domaine comporte N nœuds, on est amené à résoudre un système de N équations à N inconnues. Le système obtenu sera résolu par des méthodes numériques de résolution.

III.7.1.2 Résolution des équations algébrique

La solution des équations algébriques peut être obtenue par la méthode d'élimination de GAUSS, à cause de la particularité simplifiée de l'équation, le processus d'élimination, abouti à un algorithme simplifié.

Ceci quelque fois appelé algorithme de THOMAS ou T.D.M.A (Tri diagonal Matrix Algorithm) [94-95]. La désignation T.D.M.A se rapporte au fait que la matrice a des coefficients qui sont décrit tous en trois termes alignés en diagonal.

De la figure précédente, on numérote de 1, 2, ..., N, les nœuds du maillage.

Les équations algébriques peuvent être mises sous la forme :

$$a_i \phi_i = b_i \phi_{i+1} + c_i \phi_{i-1} + d_i \quad (\text{III-84})$$

Pour $i=1,2,\dots, N$; ainsi le potentiel électrique Φ est rapporté au voisinage des potentiels électriques Φ_{i-1} et Φ_{i+1} tenons compte de la forme spéciale des équations aux nœuds limites.

Nous posons $C_1=0, B_N=0$.

Ainsi les potentiels vecteurs Φ_{i-1} et Φ_{i+1} n'auront aucun rôle significatif à jouer (quand les potentiels aux nœuds limites sont donnés, les équations prennent une forme triviale par exemple).

Si Φ_1 est donnée, nous avons $a_1=1, b_1=0, c_1=0$ et d_1 la valeur de Φ_1 , ces conditions impliquent que Φ_1 est connue en terme de Φ_2 .

L'équation pour $i = 2$ est en relation avec Φ_2 et Φ_3 , mais puisque Φ_1 peut être exprimé en termes Φ_2 cette relation se réduit à la relation entre Φ_2 et Φ_3 , en d'autre terme Φ_2 peut-être exprimer en terme de Φ_3 .

Ce processus de substitution peut continuer jusqu'à ce que Φ_n est formellement exprimée en terme de Φ_{n+1} , mais puisque Φ_{n+1} n'existe pas réellement, nous obtenons la valeur numérique de Φ_n à cette étape, cela nous permet d'obtenir Φ_{n+1} à partir de Φ_n , Φ_{n-2} à partir de $\Phi_{n-1}, \dots, \Phi_2$ à partir de Φ_1 , Φ_1 et à partir de Φ_0 . Ceci est l'essence de la TDMA.

Supposons que dans le processus de substitution, on cherche à obtenir la relation suivante :

$$\Phi_i = P_i \Phi_{i+1} + Q_i \quad (\text{III-85})$$

$$\Phi_{i-1} = P_{i-1} \Phi_i + Q_{i-1} \quad (\text{III-86})$$

Substituant l'équation (III-86) dans l'équation (III-84) nous aurons :

$$a_i \Phi_i = b_i \Phi_{i+1} + C_i (P_{i-1} \Phi_i + Q_{i-1}) + d_i \quad (\text{III-87})$$

Les coefficients P_i et Q_i sont calculés par les expressions :

$$\begin{cases} P_i = \frac{b_i}{a_i - C_i P_{i-1}} \\ Q_i = \frac{d_i + C_i Q_{i-1}}{a_i - C_i P_{i-1}} \end{cases} \quad (\text{III-88})$$

il y a une relation de récurrence, puisque P_i et Q_i sont données en termes de P_{i-1} et Q_{i-1} .

$$\text{Pour } i=1 ; \text{ on a } \begin{cases} P_1 = \frac{b_1}{a_1} \\ Q_1 = \frac{d_1}{a_1} \end{cases}$$

Au nœud limite final, nous aurons $b_N = 0$, cela conduit à $P_N = 0$ et à partir de l'équation (III.87), nous obtenons $\Phi_n = Q_n$.

III.7.1.3 Formulation unidimensionnelle de l'équation de Schrödinger par la MVF

L'équation de Schrödinger dans le cas unidimensionnel est :

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m^*} \frac{\partial \chi^k}{\partial z} \right) dz \right] + V \chi^k = E^k \chi^k \quad (\text{III-89})$$

Intégrons cette équation sur le volume fini limité par l'interface (e, w) :

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[\int_w^e \left(\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m^*} \frac{\partial \chi^k}{\partial z} \right) \right) dz \right] + \int_w^e V \chi^k dz = \int_w^e E^k \chi^k dz \quad (\text{III-90})$$

De la même manière que l'équation de Poisson, on choisit un profil linéaire. L'intégration de la partie gauche de l'équation (III-90) donne :

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m_e^*} \left(\frac{\chi_E^k - \chi_P^k}{(\delta z)_e} \right) - \frac{1}{m_w^*} \left(\frac{\chi_P^k - \chi_w^k}{(\delta z)_w} \right) \right] + V_P \chi_P^k \Delta z \quad (\text{III-91})$$

L'intégration de la partie droite de l'égalité (III-90) donne :

$$\int_w^e E^k \chi^k dz = E^k \chi_P^k \Delta z \quad (\text{III-92})$$

Ainsi l'équation algébrique finale s'écrit sous la forme :

$$a_P \chi_P^k = a_E \chi_E^k + a_W \chi_W^k \quad (\text{III-93})$$

Avec :

$$a_E = \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{1}{(\delta z)_e}$$

$$a_W = \frac{\hbar^2}{2m_w^*} \frac{1}{(\delta z)_w}$$

$$a_P = a_E + a_W + (V_P - E^k) \Delta z$$

Le résultat obtenu représente une équation algébrique reliant l'inconnue au nœud principal "P" aux inconnus aux nœuds voisins "W", "E". Remarquer que cette équation algébrique ne contient pas le terme source S_P .

III.7.1.4 Résolution de l'équation de Schrödinger

L'équation algébrique résultant de la discrétisation de l'équation de Schrödinger par la MVF ne contient pas le terme source ce qui donne une solution triviale. Ce type des problèmes est dit problème des valeurs et des vecteurs propres. Les conditions aux limites du type Dirichlet de valeur nulle sont imposées à la limite du domaine.

Cette méthode aboutie à un système symétrique de valeur propre, $Kz = \lambda z$, où K est une matrice symétrique. La résolution se fait par des méthodes adéquates.

III.7.2 Résolution analytique et numérique de l'équation de continuité :

III.7.2.1 Densités de courant des porteurs minoritaires (photocourant généré) :

Dans ce qui a précédé, les expressions du champ électrique dans les différentes régions de la cellule ont été établies. Sur cette base, nous calculerons dans ce qui suit, les densités de courant des porteurs minoritaires dans ces mêmes régions.

III.7.2.1.1 Equation de continuité des électrons dans la région P :

Les équations de continuité décrivent les variations temporelles des concentrations des porteurs. Ces variations des concentrations des trous ou des électrons sont à lier aux générations dues aux agents externes, aux générations et aux recombinaisons internes, ainsi qu'aux phénomènes de transport.

III.7.2.1.2 Expression de l'équation de continuité dans la région P $0 \leq z \leq z_p$:

L'équation de continuité des porteurs minoritaires dans la région P s'écrit :

$$\frac{\partial \Delta n}{\partial t} = g_n - r_n + n\mu_n \frac{\partial E_p}{\partial z} + \mu_n E_p \frac{\partial \Delta n}{\partial z} + D_n \frac{\partial^2 \Delta n}{\partial z^2} \quad (\text{III-94})$$

Où $E_p(x)$ est le champ électrique dans cette région, il est donné par :

$$E_p(z) = -\frac{ep_i}{\varepsilon} (z - z_{in}) \quad (\text{III-95})$$

g_n est le taux de génération des paires électron-trou par des agents externes.

r_n est le taux de recombinaison interne des électrons, il est de la forme :

$$r_n = \frac{\Delta n}{\tau_n} \quad (\text{III-96})$$

Où $\Delta n = n - n_0$ est la concentration des électrons en excès et $n_0 = \frac{n_i^2}{N_a}$ est la concentration des électrons à l'équilibre.

En régime permanent, c'est-à-dire lorsque $n(z)$, le nombre d'électrons est constant, alors :

$$\frac{\partial \Delta n}{\partial t} = 0 \quad (\text{III-97})$$

De ce fait, la relation précédente devient :

$$D_n \frac{\partial^2 \Delta n}{\partial z^2} + n \mu_n \frac{\partial E_p}{\partial z} + \mu_n E_p \frac{\partial \Delta n}{\partial z} + g_n(\lambda, z) - \frac{n - n_0}{\tau_n} = 0 \quad (\text{III-98})$$

De plus,

$$\frac{\partial E_p}{\partial z} = -\frac{ep_i}{\varepsilon} = -\frac{en_i}{\varepsilon} \quad (\text{III-99})$$

Sachant que

$$g_n(\lambda, z) = F(\lambda)\alpha(\lambda)(1 - R(\lambda))e^{-\alpha z} \quad (\text{III-100})$$

et $D_n \tau_n = L_n^2$

On obtient finalement, en remplaçant par leurs expressions respectives, le champ $E_p(z)$, sa dérivée et $g_n(\lambda, z)$, la relation donnant l'équation de continuité sous forme d'une équation différentielle de deuxième ordre à coefficients variables avec second membre qui dépend de z :

$$\frac{\partial^2 \Delta n}{\partial z^2} - A_1(z) \frac{\partial \Delta n}{\partial z} - B_1 n = C_1(z) \quad (\text{III-101})$$

Avec :

$$A_1(z) = -\frac{\mu_n ep_i}{D_n \varepsilon} (z_{in} - z); \quad B_1 = \frac{\mu_n ep_i}{D_n \varepsilon} + \frac{1}{L_n^2}; \quad (\text{III-102})$$

$$C_1(z) = -\frac{F \cdot \alpha (1 - R) e^{-\alpha z}}{D_n} - \frac{n_i^2}{L_n^2 N_a}$$

III.7.2.1.3 Equation de continuité, sa résolution et densité de courant des trous dans la région N $z_p + z_i \leq z < H$

Dans la région N, le champ électrique est de la forme :

$$E_N(z) = \frac{en_i}{\varepsilon}(z - z_{ip}) \quad (\text{III-103})$$

L'équation de continuité des porteurs minoritaires dans cette même région s'écrit :

$$\frac{\partial \Delta p}{\partial t} = g_p - r_p - p\mu_p \frac{\partial E_N}{\partial z} - \mu_p E_N \frac{\partial \Delta p}{\partial z} + D_p \frac{\partial^2 \Delta p}{\partial z^2} \quad (\text{III-104})$$

Le taux de recombinaison est donné par :

$$r_p = \frac{\Delta p}{\tau_p} \quad (\text{III-105})$$

où $\Delta p = p - p_0$ est la concentration des électrons en excès et $p_0 = \frac{p_i^2}{N_d}$ est la concentration des électrons à l'équilibre.

En régime permanent, et pour les mêmes raisons que précédemment, l'équation différentielle ci-dessus peut être mise sous la forme suivante :

$$\frac{\partial^2 \Delta p}{\partial z^2} - A_1(z) \frac{\partial \Delta p}{\partial z} - B_1 p = C_1(z) \quad (\text{III-106})$$

Avec :

$$A_1(z) = \frac{\mu_p en_i}{D_p \varepsilon}(z - z_{ip}); \quad B_1 = \frac{\mu_p en_i}{D_p \varepsilon} + \frac{1}{L_p^2}; \quad (\text{III-107})$$

$$C_1(z) = -\frac{F \cdot \alpha(1 - R)e^{-\alpha z}}{D_p} - \frac{p_i^2}{L_p^2 N_p}$$

$P(z)$ est déterminé numériquement de la même manière que $n(z)$ par résolution de l'équation de Schrödinger.

III.7.2.1.4 Résolution de l'équation de continuité par la méthode du volume finis (numérique) :

CHAPITRE III Modèle semi-analytique du transport électronique dans les cellules solaires à puits quantiques

Si on considère la cellule d'épaisseur z , soumis à aucune tension extérieure ($E=0$), et éclairé uniformément sur l'une de ses faces par un rayonnement permanent d'énergie supérieure au gap.

Le régime étant stationnaire, $dn/dt=0$, l'équation de diffusion dans la région p s'écrit :

$$D_n \frac{\partial^2 \Delta n}{\partial z^2} - \frac{n - n_0}{\tau_n} + g_n(\lambda, z) = 0$$

avec

$$g_n(\lambda, z) = F(\lambda)\alpha(\lambda)(1 - R(\lambda))e^{-\alpha z}$$

où suivant la nature du matériau, D_n représente le coefficient de diffusion des porteurs minoritaires. En introduisant la longueur de diffusion des porteurs $L_n = \sqrt{\tau_n D_n}$, l'équation s'écrit :

$$\frac{\partial^2 \Delta n}{\partial z^2} - \frac{n - n_0}{L_n^2} = - \frac{F(\lambda)\alpha(\lambda)(1 - R(\lambda))e^{-\alpha z}}{D_n}$$

Intégrons cette équation sur le volume fini limité par l'interface (e, w)

$$\int_w^e \frac{\partial^2 \Delta n}{\partial z^2} dz - \int_w^e \frac{n - n_0}{L_n^2} dz = \int_w^e - \frac{F(\lambda)\alpha(\lambda)(1 - R(\lambda))e^{-\alpha z}}{D_n} dz$$

Après l'intégration on aura :

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\Delta n_E - \Delta n_P}{(\delta z)_e} \right] - \left[\frac{\Delta n_P - \Delta n_W}{(\delta z)_w} \right] - \frac{\Delta n_P}{L_n^2} \Delta z = - \frac{F(\lambda)\alpha(\lambda)(1 - R(\lambda))e^{-\alpha z}}{D_n} \Delta z \\ & - \left[\frac{1}{(\delta z)_e} + \frac{1}{(\delta z)_w} + \frac{\Delta z}{L_n^2} \right] \Delta n_P + \frac{1}{(\delta z)_e} \Delta n_E + \frac{1}{(\delta z)_w} \Delta n_W = - \frac{F(\lambda)\alpha(\lambda)(1 - R(\lambda))e^{-\alpha z}}{D_n} \Delta z \\ & - a_p \Delta n_P + a_E \Delta n_E + a_W \Delta n_W = - \frac{F(\lambda)\alpha(\lambda)(1 - R(\lambda))e^{-\alpha z}}{D_n} \Delta z \end{aligned}$$

Ainsi l'équation algébrique finale s'écrit sous la forme :

$$a_p \Delta n_P = a_E \Delta n_E + a_W \Delta n_W + S_P$$

Où

$$\Delta n_p = (1/a_p)(a_E \Delta n_E + a_W \Delta n_W + S_p) \quad (\text{III-108})$$

avec

$$a_p = \left[\frac{1}{(\delta z)_e} + \frac{1}{(\delta z)_w} + \frac{\Delta z}{L_n^2} \right];$$

$$a_E = \frac{1}{(\delta z)_e}$$

$$a_W = \frac{1}{(\delta z)_w}$$

$$S_p = \frac{F(\lambda) \alpha(\lambda) (1 - R(\lambda)) e^{-\alpha z}}{D_n} \Delta z$$

$$J_n = q D_n \frac{d\Delta n}{dz}$$

$$\int_w^e J_n dz = q \int_w^e D_n \frac{d\Delta n}{dz} dz$$

$$J_{np} \Delta z = q((D_n \Delta n)_e - (D_n \Delta n)_w)$$

$$J_{np} = \frac{q(D_{ne}(\Delta n)_e - D_{nw}(\Delta n)_w)}{\Delta z}$$

Les conditions aux limites :

$$D_n \frac{d\Delta n}{dz} = S_n \Delta n, \quad \text{à } (z = 0)$$

$$\int_w^e D_n \frac{d\Delta n}{dz} dz = \int_w^e S_n \Delta n dz$$

$$(D_{ne}(\Delta n)_e - D_{nw}(\Delta n)_w) = S_{np} \Delta n_p \Delta z$$

$$\Delta n_p = \frac{(D_{ne}(\Delta n)_e - D_{nw}(\Delta n)_w)}{S_{np}\Delta z} = q \frac{J_{np}}{S_{np}}, \quad J_{np} = \frac{1}{q} \Delta n_p \cdot S_{np} \quad \text{à } z = 0$$

De même manière par rapport les porteurs dans la région n, on peut aussi résoudre cette équation analytiquement.

III.8 Algorithme de Couplage

Si on rassemble l'équation de Poisson, l'équation quantique (l'équation de Schrödinger) et l'équation de transport donne une matrice de la MVF non symétrique et non linéaire.

Il y'a deux modèles de couplage, le modèle de couplage direct MCD (couplage fort) et le modèle de couplage alterné MCA (couplage faible).

Dans notre cas le premier modèle n'est pas utilisé à cause de la différence existante entre les trois équations telles que l'équation algébrique résultant de la discrétisation de l'équation de Schrödinger ne contient pas le terme source. Cette équation est de type des problèmes des valeurs et des vecteurs propres. Pour cela on utilise le modèle de couplage alterné (MCA). Dans ce modèle les équations sont résolues séparément et le couplage est réalisé par la substitution des données d'un problème à l'autre. Les termes de couplage sont : l'énergie potentielle et la densité des électrons. L'organigramme utilisé pour simuler le modèle de couplage MCA par MATLAB est le suivant (Figure III.10) :

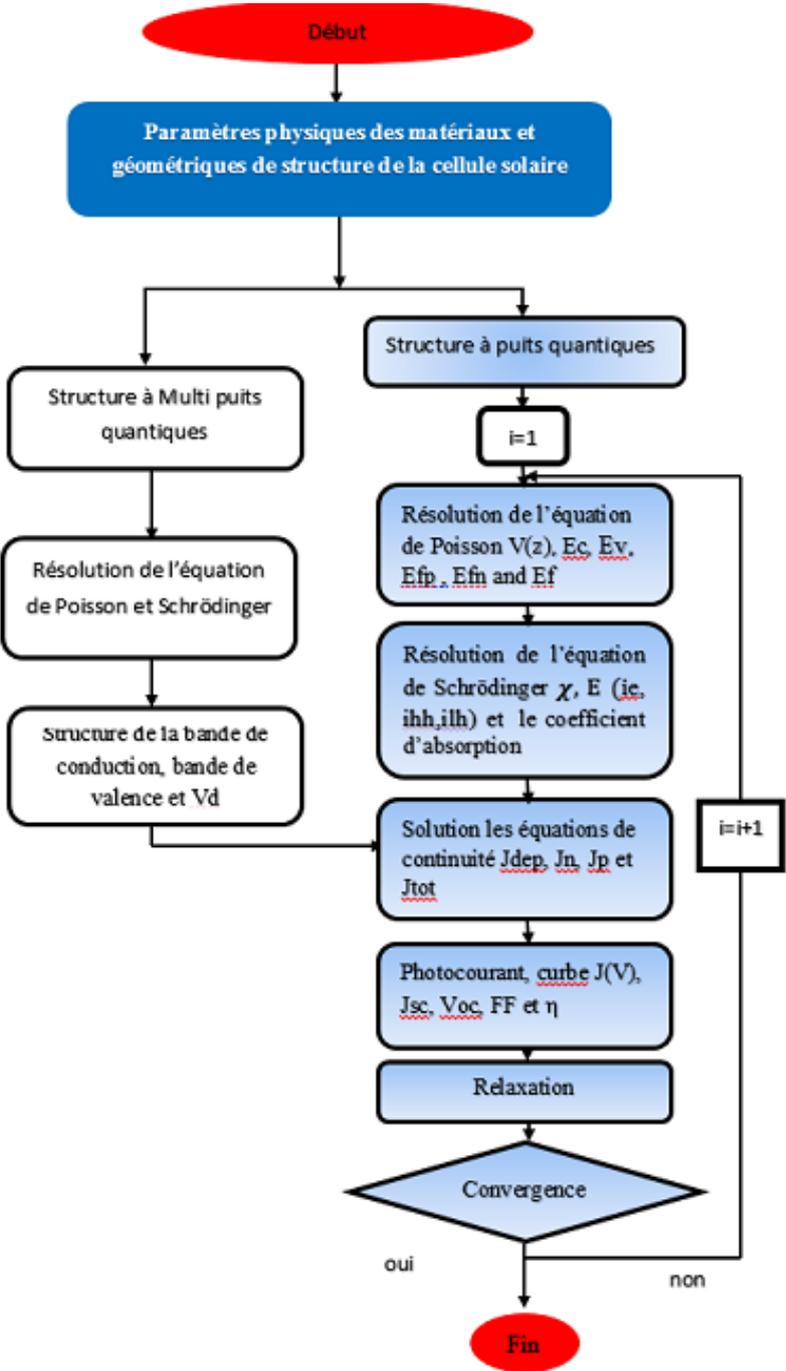


Figure III.10 : Algorithme de Couplage.

III.9 Conclusion

Pour aboutir au calcul du coefficient d'absorption, dans un premier temps, nous avons rappelé la résolution de l'équation Poisson et de Schrödinger pour un puits quantique fini qui nous a permis de trouver les niveaux d'énergies dans la structure dans l'approximation de la fonction enveloppe, nous avons présenté également les principaux paramètres pilotant le choix du matériau,

Par la suite nous avons résolu les équations de transport qui entrent dans les calculs des paramètres de sortie de la cellule. Enfin, nous avons détaillé la méthode de calcul des paramètres de sortie dans la cellule qui a été appliquée dans le calcul numérique.

**Chapitre IV :
Résultats et
discussions**

IV.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons exposer les résultats de la simulation d'une cellule solaire multicouches à base d'AlGaAs/GaAs, à jonction PIN avec multi puits quantiques dans la couche intrinsèque, en se basant essentiellement sur la modélisation du comportement électrique de la cellule, présentée au chapitre précédent.

Nous avons adopté des modèles théoriques d'Anderson et de Rimada [39-40] pour calculer les caractéristiques $J(V)$, l'efficacité quantique et la densité de court-circuit qui est le photocourant maximum généré par le QWSC sous l'irradiation (AM 1.5G), le but visé dans ce travail est d'arriver à optimiser les paramètres photoélectriques (le rendement, densité de courant,...), géométriques (largeur et profondeur des puits) et technologiques (dopage de l'émetteur et de la base) de la cellule afin d'obtenir le meilleur rendement possible.

IV.2 Structure de la cellule solaire

La cellule solaire à multi -puits quantiques à base d'AlGaAs/GaAs que nous voulons optimiser a déjà été étudiée expérimentalement par Keith. Barnham et J. P. Connolly [96-99]. Elle constituée par une série des couches d'AlGaAs avec une composition variable (la fraction molaire d'Aluminium) qui forme les barrières et de GaAs qui forme les puits. Pour améliorer l'absorption de la cellule une couche anti reflet ZnS ($n=2.36$) est ajoutée sur la face avant. Les paramètres technologiques des couches sont présentés sur le schéma de la figure (IV.1) :

Les paramètres d'entrés introduits dans le programme de simulation par MATLAB sont les paramètres du matériau (tableau IV.1) et ceux de la cellule (tableau IV.2).

Tableau IV.1 : Paramètres du matériau et sont références.

Paramètre	Expression analytique	Références
Coefficient d'absorption	$\alpha_X(\lambda) = \alpha_{GaAs}(\lambda')$ $E = hc/\lambda$ $E - E_g(x) = E' - E_g(0) - 0.62x[E - E_g(0)]^{0.5}$	[100]
Constante diélectrique relative	$\epsilon = (13.1 - 2.2x)\epsilon_0$	[101]
Mobilité	$\log_{10}(\mu_e) =$ $\left[\frac{-1.5545 + 0.0016 + (0.735 + 0.0013x)\log_{10}(N_a)}{-(0.0253 + 0.0052x)\log_{10}(N_a)^2} \right] \left(\frac{300}{T} \right) \left(\frac{cm^2}{V_s} \right)$ $\log_{10}(\mu_h) =$ $\left[\frac{-9.723 + 0.0095 + (1.576 + 0.0012x)\log_{10}(N_d)}{-(0.0507 + 0.0034x)\log_{10}(N_d)^2} \right] \left(\frac{300}{T} \right)^{\frac{3}{4}} \left(\frac{cm^2}{V_s} \right)$	[101]
Longueur de diffusion	L_e $= \left[\frac{\mu_e(N_a, x)}{\mu_e(N_a, 0)} \right] \exp(-9.72x) \left[\frac{-210.06 + 27.254\log_{10}(N_a)}{-0.850\log_{10}(N_a)^2} \right] \left(\frac{300}{T} \right)^{0.87} \mu m$ $L_h = \left[\frac{\mu_h(N_d, x)}{\mu_h(N_d, 0)} \right] \exp(-9.72x) \left[\frac{-116.92 + 14.466\log_{10}(N_d)}{-0.438\log_{10}(N_d)^2} \right] \left(\frac{300}{T} \right) \mu m$	[101]
Les masses effectives	$m_e = (0.0632 + 0.0856x + 0.0231x^2)m_0$ $m_{lh} = (0.088 + 0.0375x + 0.0163x^2)m_0$ $m_{hh} = (0.50 + 0.2x)m_0$	[102]
Taux de recombinaison superficielle	$v_s = 30 \text{ cm/s}, Sp=Sn=5.10^6 \text{ cm/s}$	[102]
Spectre d'incidents	AM1.5G	[103]
Duré de vie τ_B, τ_A	$\tau_B = 0.1 - 1ns, \text{ avec } \gamma_A = 0.1$	[104-106]
n_r	3.65	[107]

Tableau IV.2 : Différentes cellules solaire utilisée dans notre simulation [108].

Cellules	cap (μm)	p layer (μm)	p doping (cm^{-3})	n layer (μm)	n doping (cm^{-3})	i layer (μm)	Number of wells	Well width (nm)
G951	0.02	0.15	1.3×10^{18}	0.46	1.3×10^{18}	0.81	50	8.5
QT468A	0.04	0.15	9×10^{17}	0.6	2.5×10^{17}	0.48	30	8.4
QT468B	0.02	0.15	9×10^{17}	0.6	2.5×10^{17}	0.48	0	0

La cellule G951-AR est la même que la cellule G951 avec une couche antireflet.

Remarque :

La croissance des cellules G* ** par PRL.

La croissance des cellules QT* ** et CB *** au EPSRC Sheffield III-V Semiconductor Facility avec John Roberts et Chris Button, respectivement).

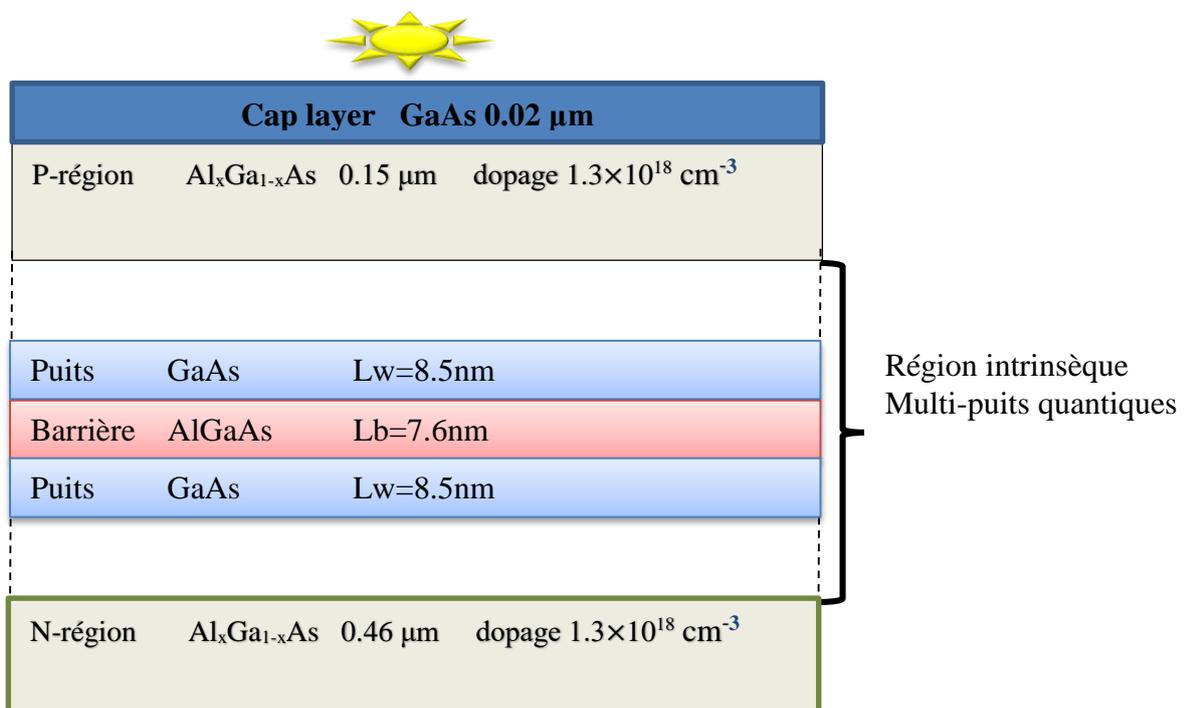


Figure IV.1 : Structure d'une cellule solaire p-i(MQW)-n (G951).

Le diagramme d'énergie de la cellule à l'état d'équilibre est présenté dans la figure IV.2.

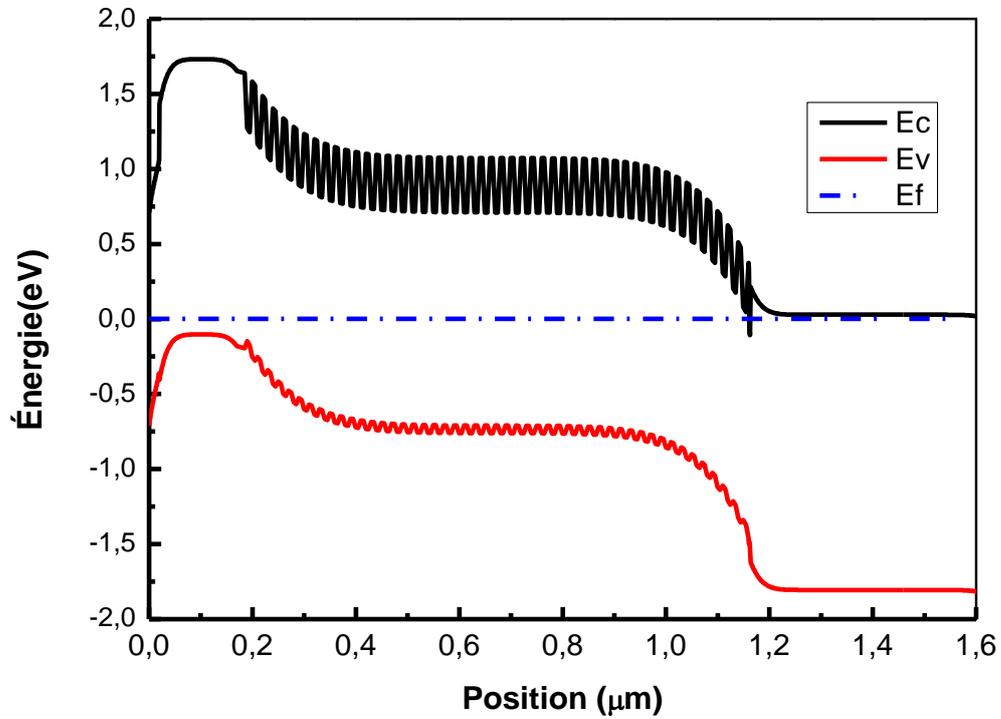


Figure IV.2 : Diagramme d'énergie de la cellule solaire G951 à l'équilibre Thermodynamique.

A partir de la résolution de l'équation de Poisson on a obtenu le potentiel et le champ électrique de la cellule G951 comme représente sur la figure (IV.3)

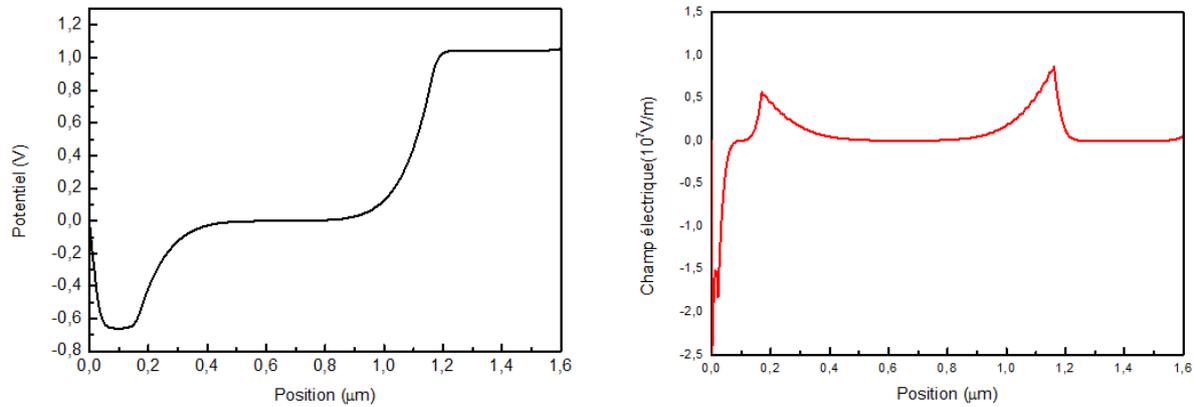
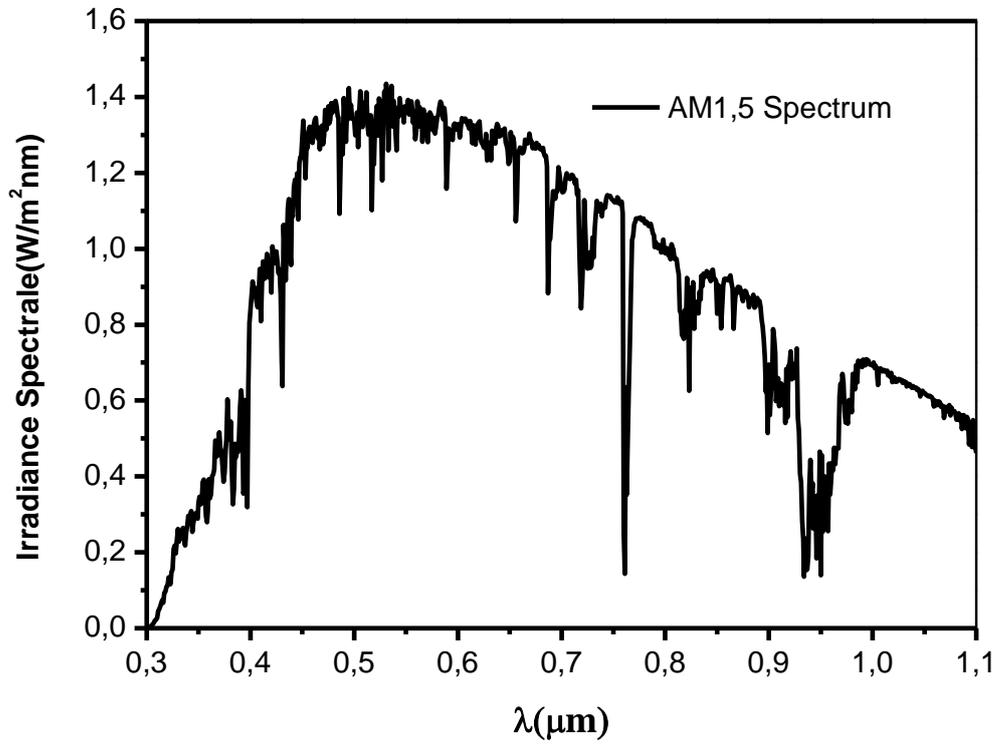


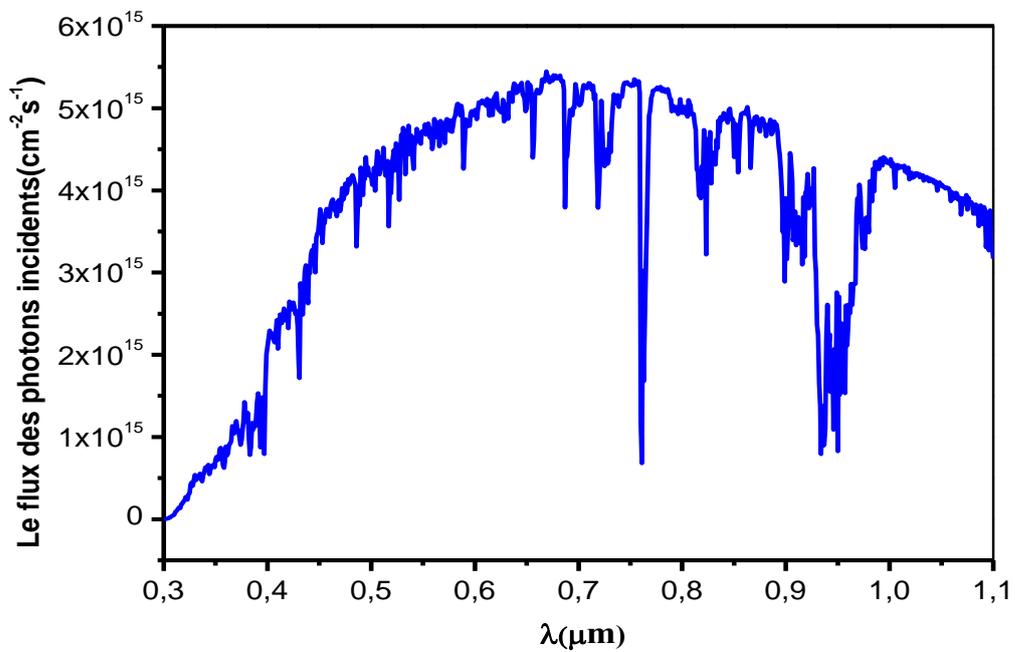
Figure IV.3: Potentiel et champ électrique de la cellule G951.

IV. 3 Modélisation de la cellule solaire

Tout au long de ce travail, on utilise les conditions standards de qualification des cellules solaires : AM1.5 G et une température de 300 K (figure IV.4). Nous allons étudier d'abord la cellule de côté quantique et les caractéristiques électrique de la cellule, en essayant d'optimiser les paramètres physiques afin d'obtenir le meilleur rendement. Nous nous sommes intéressés à la modélisation et simulation de deux différentes structures de cellule solaire ; les cellules solaire pin au $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ et les cellules solaires à puits quantique respectivement, afin de voir l'effet de l'introduction des puits quantiques GaAs sur les paramètres caractéristiques et l'efficacité quantique d'une cellule solaire au $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. En plus, on étudie l'effet de la variation de la composition chimique d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, longueur des puits et des barrières, ct. Pour chaque simulation, les caractéristiques J-V, le rendement quantique QE (Quantum Efficiency), et les paramètres caractéristiques importants d'une cellule solaire sont présentés et discutés.



a)



b)

Figure IV. 4: (a) Spectre AM1.5G, (b) Flux déduit à partir de AM1.5G.

IV.4 Étude quantique

IV.4.1 Fonctions d'ondes

Dans les puits quantiques, la faible épaisseur du matériau conduit à des propriétés électroniques particulières : les fonctions d'ondes électroniques ne peuvent prendre que les valeurs discrètes en raison de leur confinement et les niveaux d'énergie des porteurs sont quantifiés. Leur valeur dépend de la profondeur et de la largeur des puits. Ne nous considérons pas ici de superréseaux : dans les structures étudiées, les couplages entre puits quantiques adjacents pourront être toujours négligés. Le confinement quantique conduit à des sous-bandes d'énergie dans les deux bandes de conduction et de valence. Les niveaux d'énergie de ces sous bandes peuvent simuler par résolution l'équation de Schrödinger unidimensionnelle suivant l'approximation de la fonction d'onde. La figure (IV.5) montre la simulation du diagramme de bande de conduction et des fonctions d'onde des électrons de la structure de multi-puits quantiques, on observe que les fonctions d'onde dans les deux puits successive sont similaires dans chaque puits. On résulte que l'équation de Schrödinger est résolue séparément dans chaque puits.

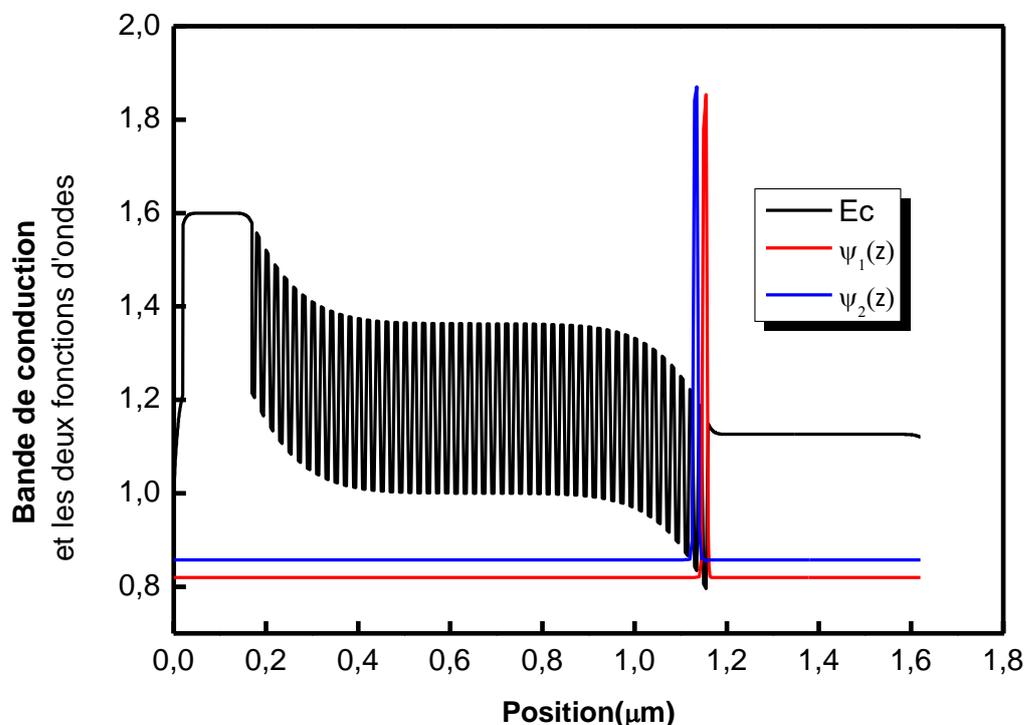


Figure IV. 5 : Bande de conduction et les fonctions d'ondes.

IV.4.2 États électroniques et les fonctions d'onde dans un puits quantique :

Puisque la zone active est constituée de plusieurs puits, il suffit d'étudier les propriétés et les caractéristiques de ces puits, car le phénomène d'absorption se produit au niveau de cette dernière, nous avons calculé les niveaux de confinement et les fonctions d'ondes d'un seul puits GaAs entre deux barrières AlGaAs figure (IV.6), ou les autres puits sont identiques.

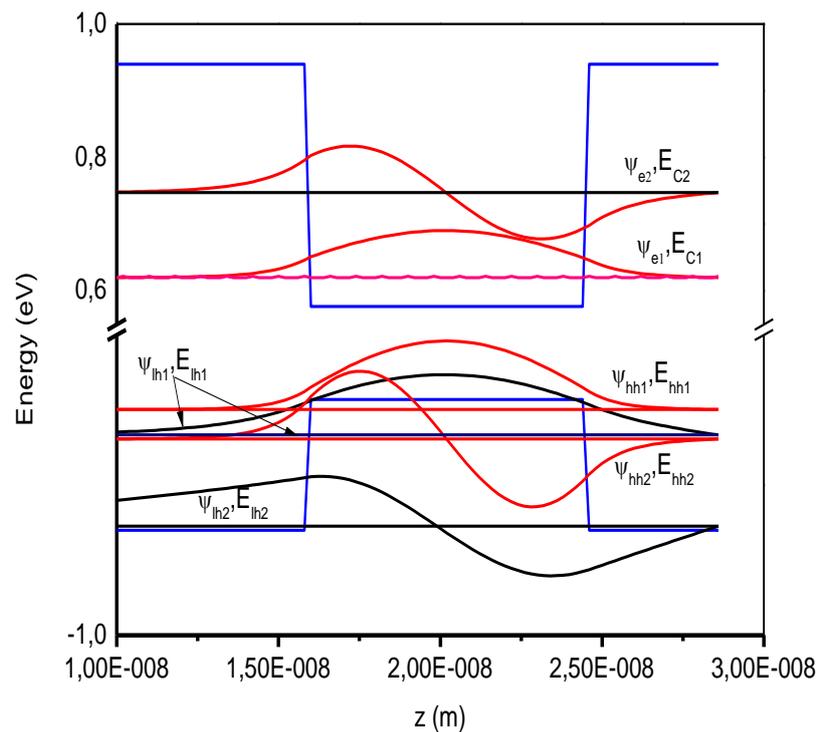


Figure IV.6 : Niveaux d'énergies et leurs fonctions d'onde dans la bande de conduction et de valence.

IV.4.3 Coefficient d'absorption

Dans une structure de multi puits quantiques, en raison du confinement des porteurs, l'énergie de liaison de l'exciton est augmentée, ce qui permet d'observer des transitions excitoniques à température ambiante. Cette transition donne lieu à pic d'absorption étroit, situé au voisinage du niveau d'énergie associé à la transition quantifiée électron-trou lourd [110]. L'existence d'une double bande de valence dans les structures à puits quantiques donne lieu à la formation de deux types d'excitons :

- L'exciton lourd (électron-trou lourd),
- L'exciton léger (électron-trou léger).

Le coefficient d'absorption utilisé dans nos simulations est celui utilisé par Jenny Nelson [85], avec l'équation :

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi q^2}{n_r c m_0^2 \omega} \sum_i \sum_j |\langle \chi_{v,i} | \chi_{c,j} \rangle|^2 \left(\frac{\mu}{\pi \hbar} \right) |eM_{cv}|^2 \sum_n \sum_n [Y(\hbar\omega - E_{gn}) + [|f_i|^2 \delta(\hbar\omega - E_n)]]$$

La figure (IV.7) montre que le coefficient est exprimé par les transitions inter bande entre les niveaux d'énergies des trous lourds et des trous légers de la bande de valence et les niveaux d'énergies des électrons de la bande de conduction.

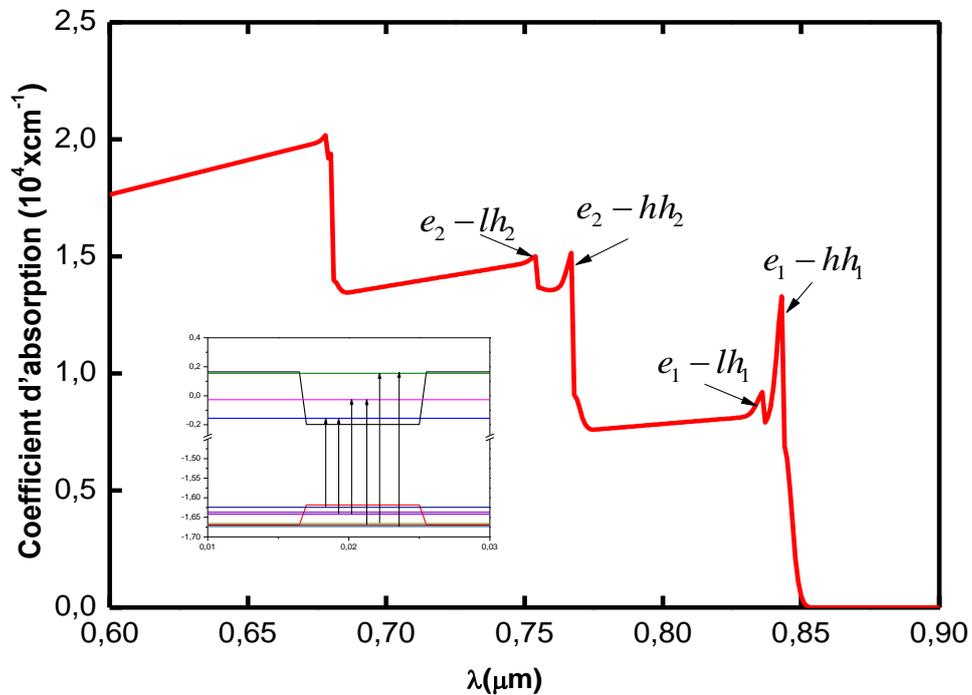


Figure IV.7 : Coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde.

IV.4.4 Efficacité quantique d'une cellule solaire G951

Les figures (IV.8) et (IV.9) montrent que le rendement quantique simulé et en relativement bon accord avec le rendement quantique expérimental.

Les figures montrent clairement que l'existence des puits quantiques dans la région intrinsèque augmente les valeurs de QE dans la région des faibles énergies et par conséquent le courant de court-circuit.

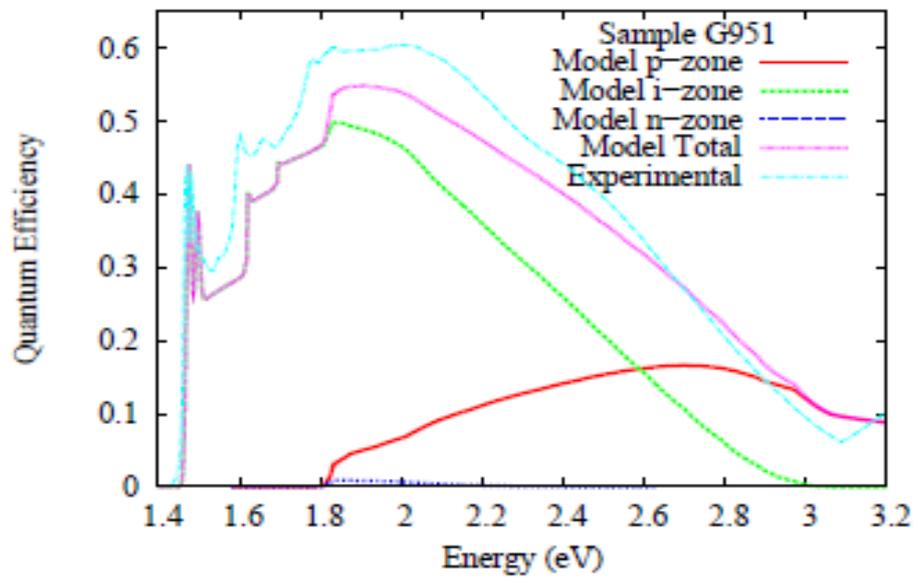


Figure IV. 8 : Rendement quantique expérimental en fonction de l'énergie.

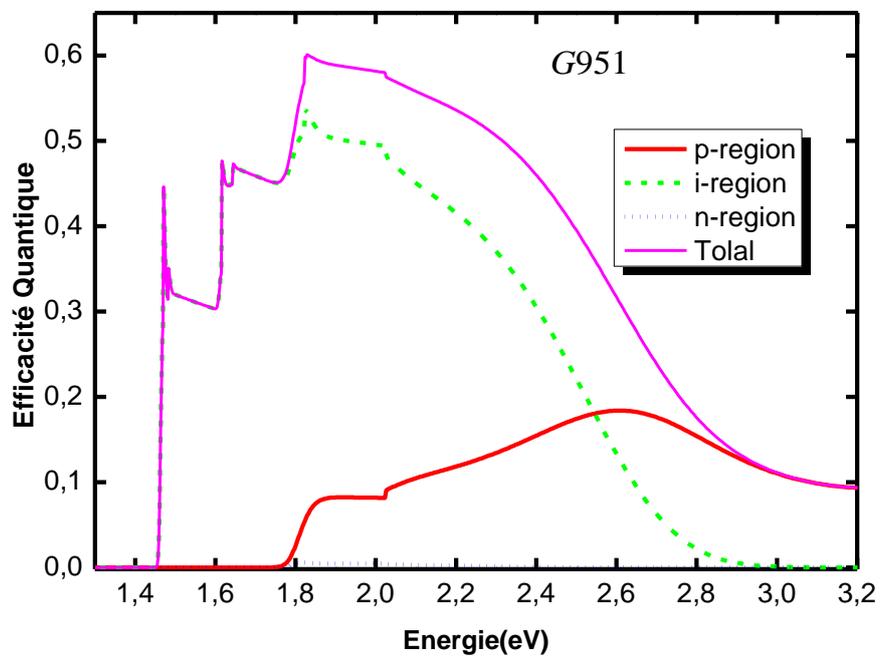


Figure IV. 9 : Rendement quantique simulé en fonction de l'énergie.

IV.5 Comparaison entre la cellule solaire à homojonction p-i (conventionnelle)-n et celle à hétérojonction p-i(MQW)-n

On a fait une étude comparative entre deux cellules, homojonction et hétérojonction (QT468A et QT468B ($x=0.36$)) et leurs résultats expérimentaux on a trouvé un bon accord.

Les grandeurs photovoltaïques des deux cellules sont données dans le tableau ci-dessous. D'après ce tableau, on remarque que les paramètres de sortie d'une cellule solaire à hétérojonction sont nettement meilleures que celles à homojonction. L'amélioration est enregistré surtout dans le courant de court-circuit et le rendement de conversion, le photocourant augmente de 6.65 à 13.91 mA/cm² et le rendement de 6.75 à 11.01%.

Tableau IV.3 : Paramètres de sortie des deux cellules : homojonction et hétérojonctions. Le premier tableau les résultats expérimentaux [109], et le deuxième les résultats (théoriques) simulés.

Solar cells	QT 468A	QT 468B
Active Area (mm ²)	8.449	8.670
Isc (mA)	1.1763	0.5408
Jsc active (mA/cm ²)	13.92	6.24
Voc (V)	1.045	1.225
FF	76.4%	81.7%
P _{max} (mW)	0.939	0.542
$\eta=P_{\max}$ (mW/cm ²)	11.1	6.2

Cellules solaire	QT 468A	QT 468B
Active Area (mm ²)	8.449	8.670
Isc (mA)	1.175	0.57668
Jsc (mA/cm ²)	13.91	6.65
Voc (V)	0.99	1.14
FF	79.89%	89.05%
P _{max} (mW)	0.92989	0.585
$\eta=P_{\max}$ (mW/cm ²)	11.01	6.75

Dans la figure (IV.10) l'efficacité quantique de la cellule solaire à hétérojonction est considérablement élevée par rapport à celle homojonction. On remarque une gamme supplémentaire varie de 0.7 à 0.85 μm qui résulte d'insertion des puits quantique dans la région intrinsèque, ce qui signifie que les photons de cette gamme sont effectivement absorbés et ne sont pas perdus et donc contribuent à la génération des paires électrons-trous.

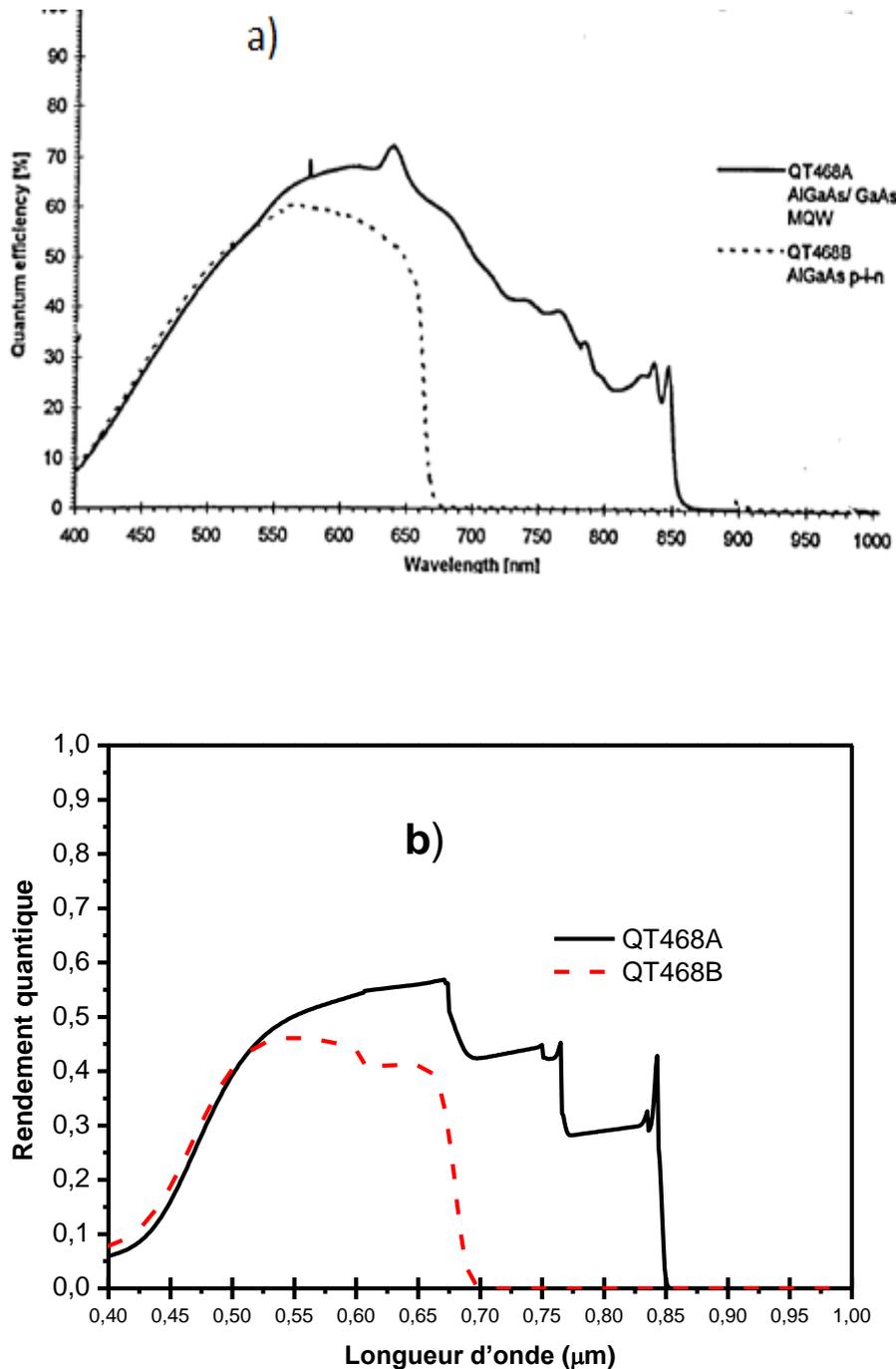


Figure IV.10 : Rendement quantique des cellules solaires QT468A/B en fonction de la longueur d'onde a) expérimental [96], b) simulé.

Des études préliminaires ont montré que l'insertion d'une série de puits quantiques dans la région intrinsèque d'une cellule solaire GaAs/AlGaAs p-i-n peut considérablement améliorer le court-circuit de la cellule ceci est démontré par la figure (IV.11), où nous remarquons un doublement de la valeur de court-circuit. L'absorption supplémentaire des photons dans les puits quantiques améliore le courant de court-circuit, tandis que la tension de circuit ouvert peut être réduite par la recombinaison des porteurs à la surface des puits, nos résultats de simulation montrent que le photocourant supplémentaire résultant de l'extension du spectre solaire peut compenser la diminution associée de la tension en circuit-ouvert.

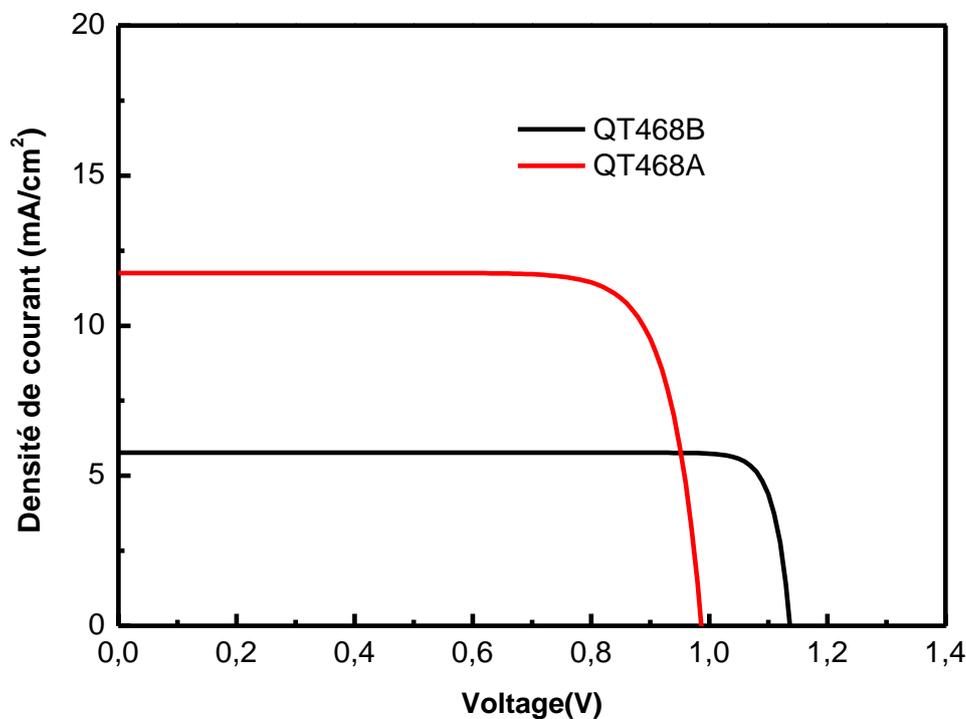


Figure IV.11 : Caractéristique J-V d'une cellule hétérojonction et homojonction.

IV.6 Effet de la fraction molaire sur la cellule solaire QT468B

On étudie les courbes (J-V) pour différentes fractions molaires avec différentes structures p-i-n, si on considère la zone active est égale (1cm^2). La figure (IV.12) montre que la diminution de la fraction molaire d'Aluminium et par conséquent un rétrécissement de la bande interdite du structure, la tension de circuit ouvert diminue de 1.1V jusqu'à 0.86V, et le courant de court-circuit augmente à cause de l'augmentation de la génération du porteur figure (IV.13).

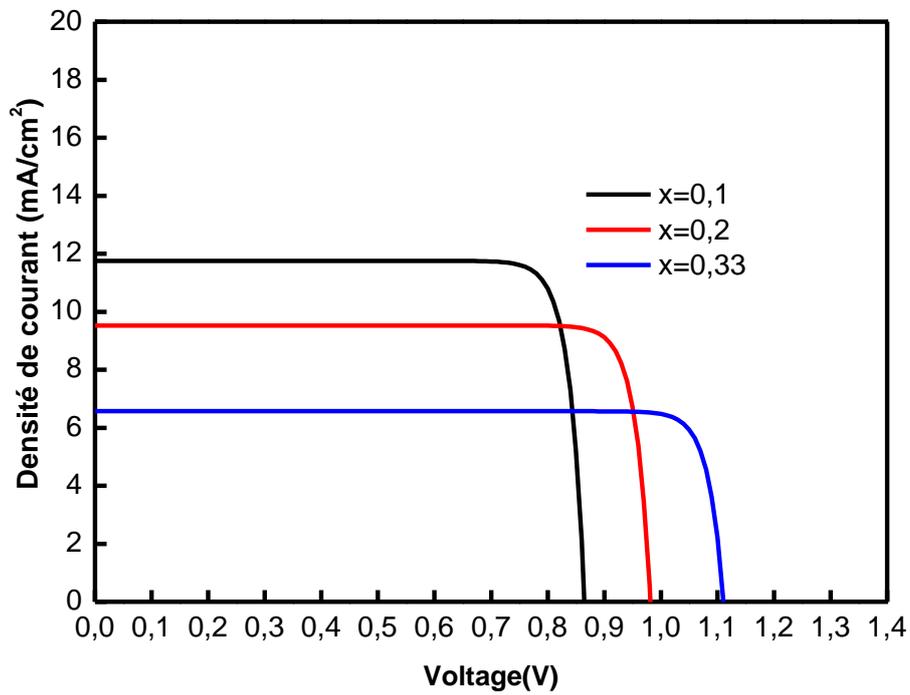


Figure IV.12 : Caractéristique J-V d'une cellule homojonction (QT468B) avec différentes fraction molaire.

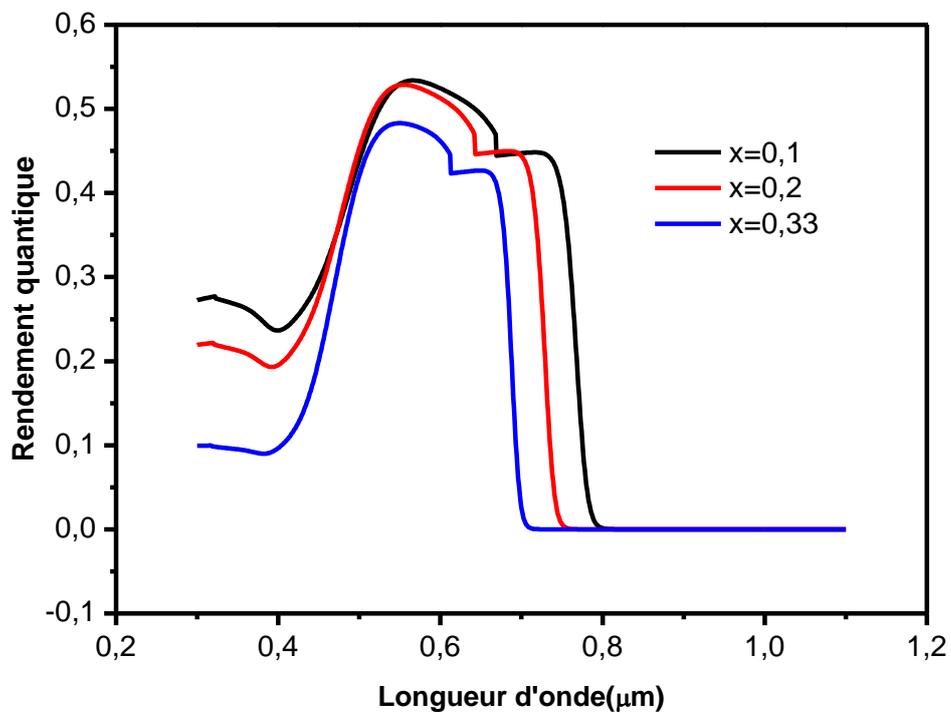


Figure IV.13 : Rendement quantique d'une cellule homojonction (QT468B) avec différentes fraction molaire.

IV.7 Influence de la couche antireflet sur la cellule solaire G951

L'utilisation d'une couche antireflet dans le processus de fabrication d'une cellule solaire est un élément important pour optimiser le rendement de la cellule photovoltaïque mais l'utilisation seule n'est pas suffisante, il faut bien choisir le matériau de cette couche. Le matériau le plus approprié à notre cellule est le ZnS ce qui est démontré par les résultats obtenus par simulation (figure IV.14).

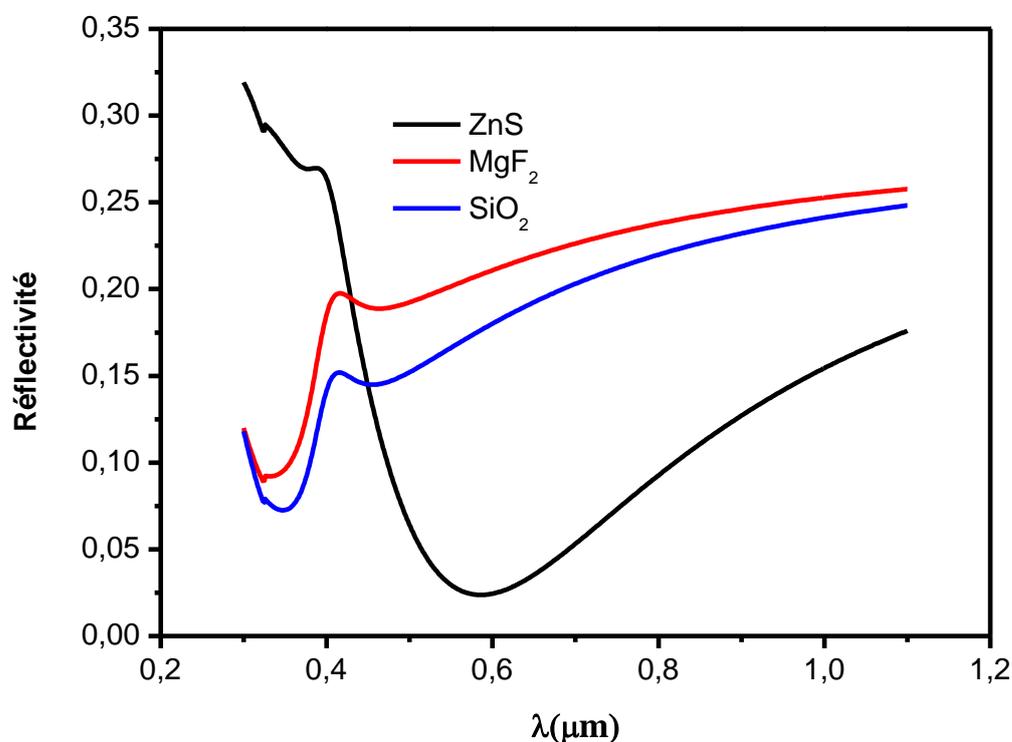


Figure IV.14 : Réflectivité d'une cellule solaire de différents matériaux de la couche antireflet en fonction de la longueur d'onde.

Dans la figure (IV.15) on peut voir que la perte par réflexion d'une cellule solaire à multi puits quantique sans couche antireflet varie avec la longueur d'onde, la perte par réflexion varie de 39%(0,4μm) à 26% (1,1μm) sous l'irradiation AM1.5G.

L'introduction d'un ARC dans cette cellule à AlGaAs/GaAs a un impact immédiat, ou la perte de réflectivité est environ 24% ($0.4\mu\text{m}$) à courtes longueurs d'onde se réduisant à environ 5% à longueurs d'onde optimale de $0.6\mu\text{m}$ et remontant à environ de 16% aux plus dans les grandes longueurs d'onde, ce qui reflète sur le rendement quantique d'une cellule solaire.

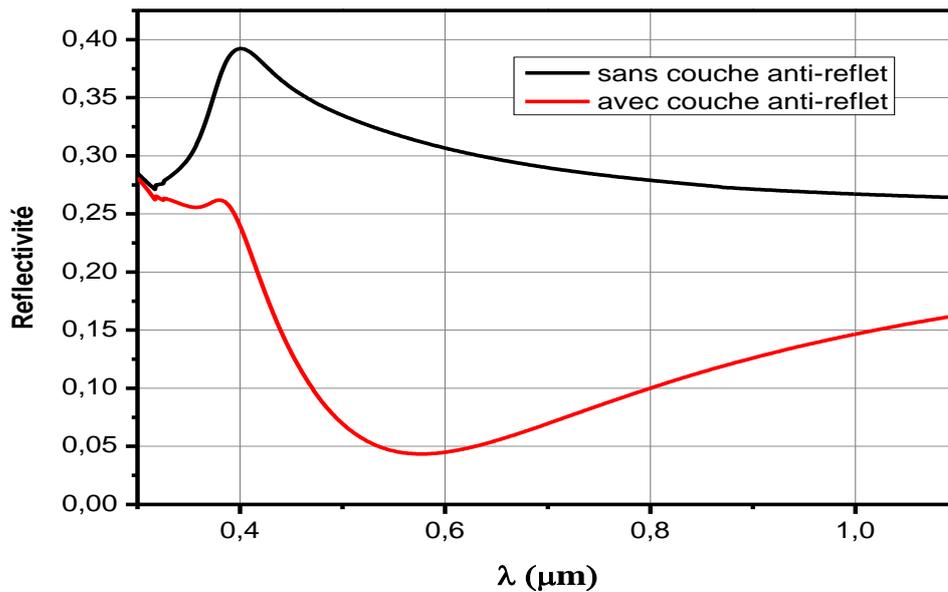


Figure IV.15 : Réflectivité d'une cellule solaire en fonction de la longueur d'onde.

L'introduction d'un ARC dans cette cellule à base GaAs/AlGaAs p-i-n peut considérablement améliorer le court-circuit de la cellule ceci est démontré par la figure (IV.16), ou nous remarquons un doublement de la valeur de court-circuit, par contre une légère augmentation dans le circuit-ouvert et la figure (IV.17) montre une considérable variation dans le rendement quantique due à la variation de réflectivité.

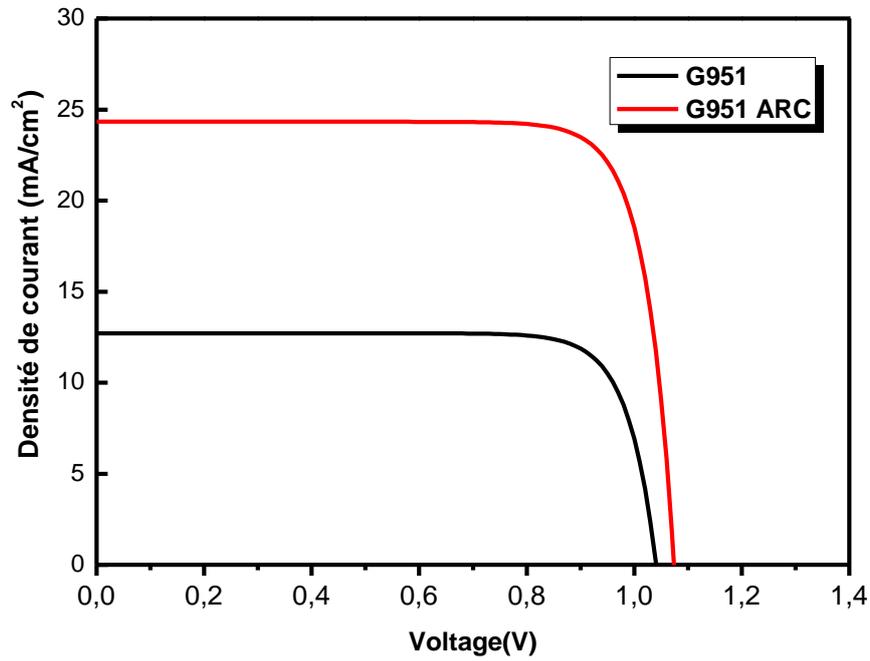


Figure IV.16 : Caractéristique J-V d'une cellule solaire sans et avec couche antireflet.

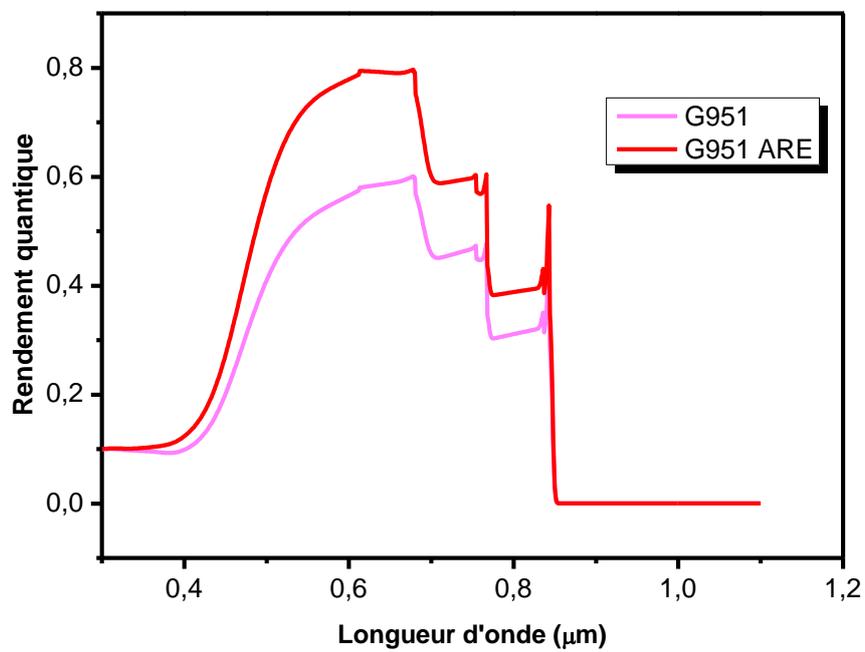


Figure IV.17 : Rendement quantique d'une cellule avec et sans couche antireflet.

Les paramètres de sorties des cellules G951 et G951-ARC sont enregistré dans le tableau suivant :

Tableau IV.4 : Paramètres de sortie des cellules G951 et G951-ARC.

Cellules	J_{sc} (mA/cm ²)	V_{oc} (V)	FF%	η %
G951	12.71	1.04	80.91	10.69
G951 –ARC	24.33	1.07	81.6134	21.246

L'utilisation d'une couche antireflet permet de diminuer les effets de pertes par réflexion et c'est ce qui est montré dans le tableau (IV-4), on remarque que la photo courant s'élève de 12.71 mA à 24.33 mA et le rendement de 10.69 % à 21.24. Avec une couche antireflet, on améliore le rendement quantique, il atteint une valeur élevée.

IV. 8 Effet de la fraction molaire d'Al dans les barrières sur la cellule solaire G951-ARC

Les courbes J-V pour différentes cellules solaires avec différentes structure d'i-région qui incluent différentes fractions molaire d'Al dans les barrières sont étudiées. Dans ce cas on a considéré le nombre des puits est cinquante, avec de la largeur de puits est 8.5 nm et de la barrière est 7.6 nm et la fraction molaire d'Aluminium est augmenté de 0.1 jusqu'à 0.33.

La figure (IV-18) montre qu'ont augmentant les fractions molaires dans les barrières, le court-circuit dans la région intrinsèque réduit rapidement que la tension du circuit ouvert. On peut expliquer La réduction des valeurs du circuit ouvert avec l'augmentation de la fraction molaire par la relation (I-33).

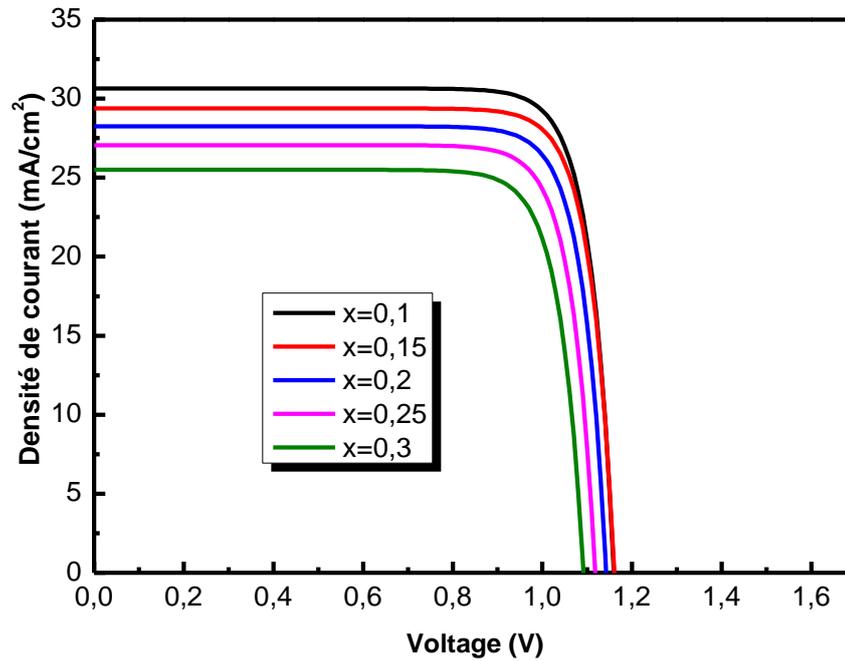


Figure IV.18 : Caractéristique (J-V) d'une cellule solaire avec différentes fractions molaires dans les barrières.

La Figure(IV.19) représente le rendement quantique d'une cellule solaire à base $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ en fonction de la longueur d'onde. On voit clairement que la cellule solaire avec la fraction molaire 0.1 dans les barrières exploite une plus grande partie du spectre solaire incident que les autres, surtout dans la gamme des longueurs d'ondes comprise entre $\sim 0,67\text{-}0,88 \mu\text{m}$. Ceci est dû au nombre des états d'énergies élevés présents dans les puits quantiques GaAs qui permet d'absorber un grand nombre des photons incidents.

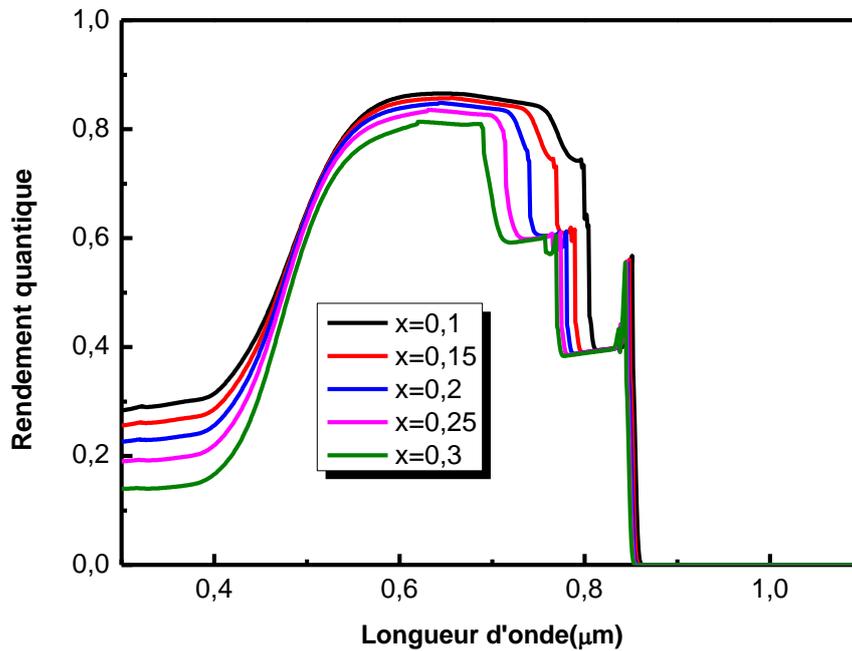


Figure IV.19 : Rendement quantique d'une cellule solaire avec différentes fractions molaires dans les barrières.

Les paramètres de sortie extraits sont présentés dans le tableau (IV.5) et dans la figure(IV.20) :

Tableau IV.5 : Effet de la fraction molaire d'Aluminium dans les barrières sur les paramètres de sortie de la cellule solaire.

Fraction molaire d'Al	J_{sc} (mA/cm^2)	V_{oc} (V)	FF%	$\eta\%$
0.1	30.64	1.16	82.27	29.24
0.15	29.38	1.16	82.32	28.06
0.2	28.28	1.14	82.24	26.48
0.25	27.05	1.12	81.65	24.74
0.3	25.49	1.09	81.61	22.68

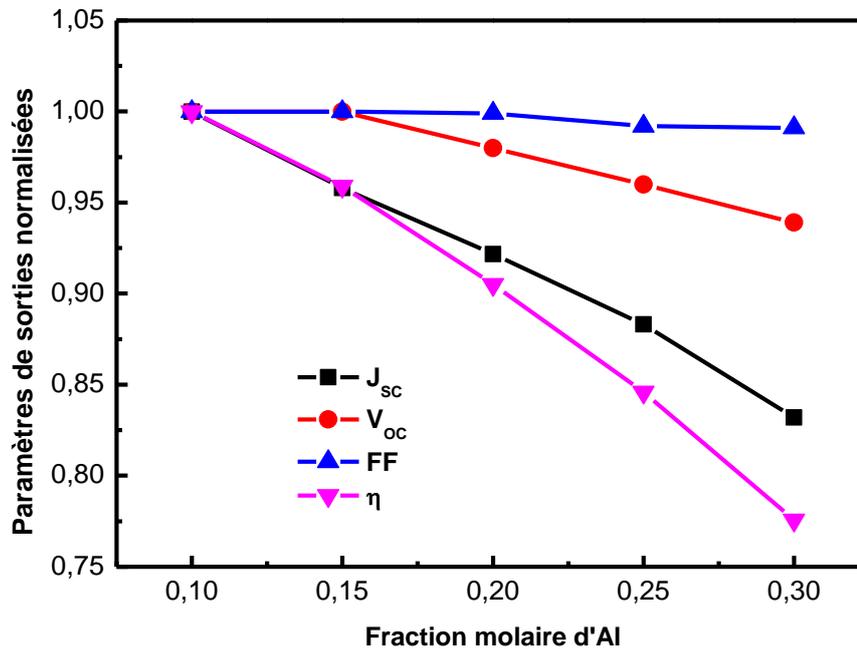


Figure IV. 20 : Effet de la fraction molaire d'Aluminium dans les barrières sur les paramètres de sortie de la cellule solaire.

A partir des résultats obtenus (la figure IV.20 et le tableau IV.5), les paramètres de sortie de la cellule solaire diminuent avec l'augmentation de la fraction molaire. On remarque que le court-circuit et le rendement sont les plus affectés, tandis que FF et V_{oc} diminuent légèrement. La profondeur du puits ΔE est liée à la fraction molaire d'Aluminium. Quand il y a une augmentation de la fraction molaire dans les barrières ΔE augmente, et induit une augmentation des recombinaisons (équation I.33). Les autres paramètres influencés par la fraction molaire d'Aluminium sont les coefficients d'absorption dans les puits quantiques.

La figure (IV.21) montre l'effet de la fraction molaire d'Aluminium dans le coefficient d'absorption. Comme représenté sur la figure, avec l'augmentation de la fraction molaire d'Aluminium dans les barrières, le coefficient d'absorption des premiers niveaux d'énergies diminue et se déplace vers des longueurs d'ondes plus courtes. L'augmentation de la recombinaison et la diminution du coefficient d'absorption peuvent expliquer la réduction des paramètres de sortie de la cellule, à savoir J_{sc} et η.

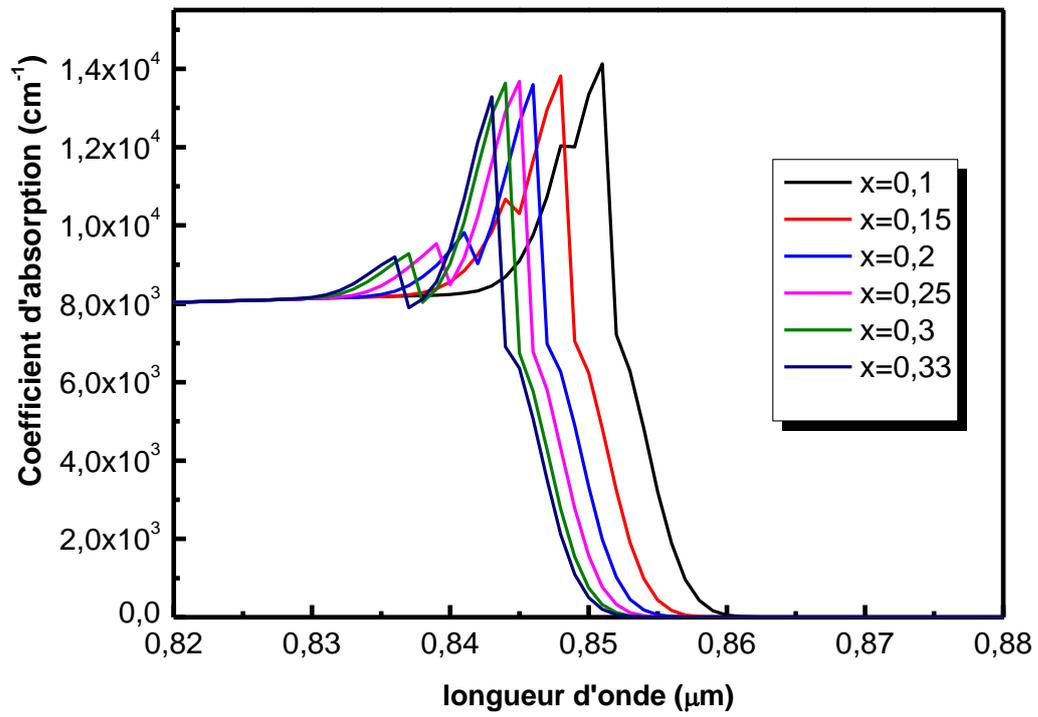


Figure IV. 21 : Coefficient d'absorption d'une cellule avec différentes fractions molaires dans les barrières.

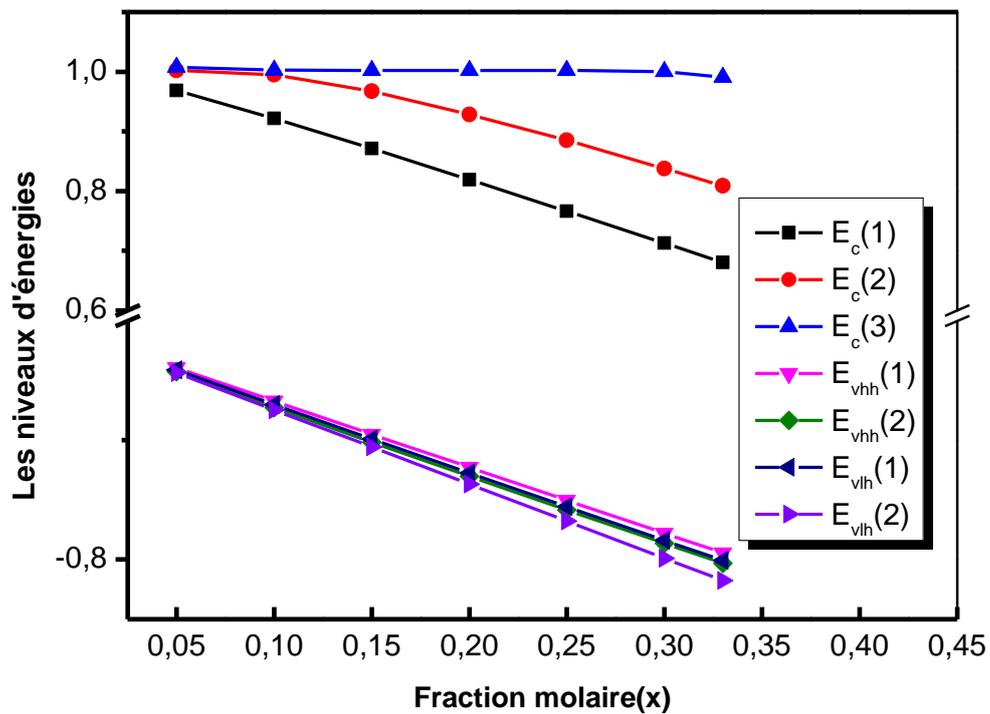


Figure IV.22 : Niveaux d'énergies dans un puits quantique d'une cellule avec différentes fractions molaires dans les barrières.

On remarque dans la figure (IV.22) :

- L'augmentation de la fraction molaire crée un espacement significatif entre les niveaux d'énergie de la bande de conduction, mais dans la bande de valence l'espacement entre les niveaux peut être négligé.
- Quand la fraction molaire d'Aluminium dans les barrières est égale 0.33, les énergies des transitions entre les premiers niveaux d'énergies de la bande de conduction et de valence plus moins que dans les autres fractions molaires d'Aluminium dans les barrières, ce qui reflète au coefficient d'absorption (figure IV.21-IV.19).

IV.9 Effet du nombre des puits quantiques sur la cellule solaire G951-ARC

Les cellules solaires à puits quantiques sont des dispositifs spéciaux à bandes multiples ayant des propriétés intermédiaires entre les cellules hétérojonctions, cette approche consiste en un système de multi-puits quantiques dans la région intrinsèque d'une cellule p-i-n de semi-conducteur à bande interdite (barrières et puits) pour améliorer la réponse spectrale (le rendement quantique) de la cellule dans la région intrinsèque.

Le but de cette conception est que les puits absorbent des photons supplémentaires augmentant le courant de court-circuit, la chute de la tension en circuit- ouvert à l'inclusion du matériau à bande interdite inférieure est surcompensée par le courant de court-circuit (J_{sc}) dû au courant photoélectrique supplémentaire des puits quantiques.

La figure (IV.23) représente le (J-V) de la cellule solaire à puits quantique $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ pour un nombre de puits variable : 50, 40, 30, 20 et 10 respectivement. Comme on peut le voir, le courant de court-circuit augmente avec l'accroissement du nombre de couches de puits quantique, qui est due aux paires électrons-trous supplémentaires absorbées par les puits quantique de GaAs.

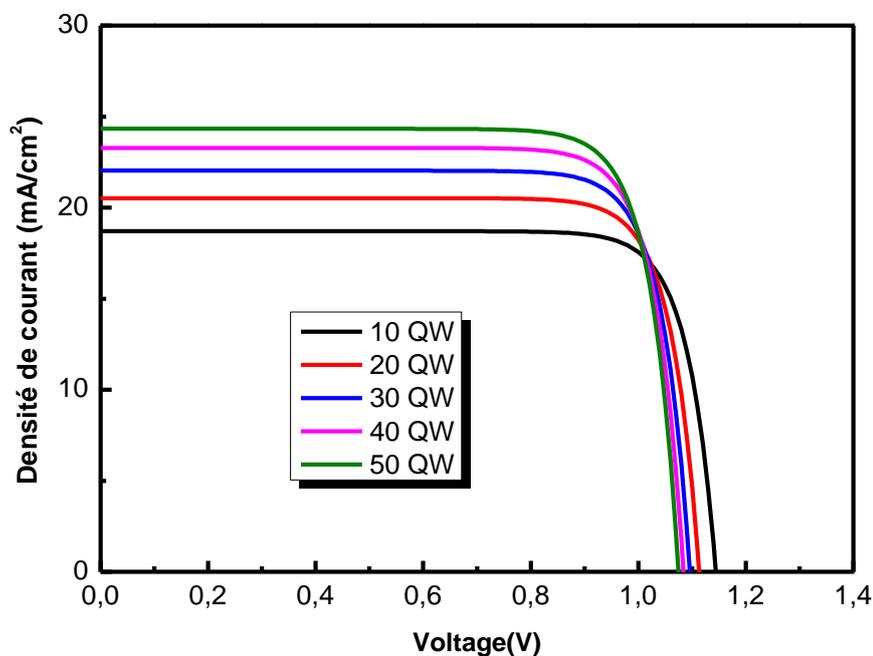


Figure IV.23 : Caractéristiques (J-V) pour différents nombres des puits quantiques.

Dans l'introduction, on a dit que le but le plus important d'utilisation des cellules solaires à puits quantique est bien d'aider les photons moins énergétiques (grandes longueurs d'onde) à être absorbés et donc participer à la génération du courant fournie par la cellule. Avec l'insertion des puits quantiques de GaAs à l'intérieur de la zone intrinsèque d'une cellule solaire pin à base d'AlGaAs, les longueurs d'ondes comprises entre $0.67 \mu\text{m}$ et $0.88 \mu\text{m}$ peuvent être absorbées. La figure (IV.24) représente le rendement quantique d'une cellule solaire avec puits quantique de GaAs pour le nombre de couches de puits quantique variable. On voit une augmentation verticale dans le QE d'une cellule solaire à puits quantiques dans la gamme des longueurs d'ondes $0.67\sim 0.88 \mu\text{m}$.

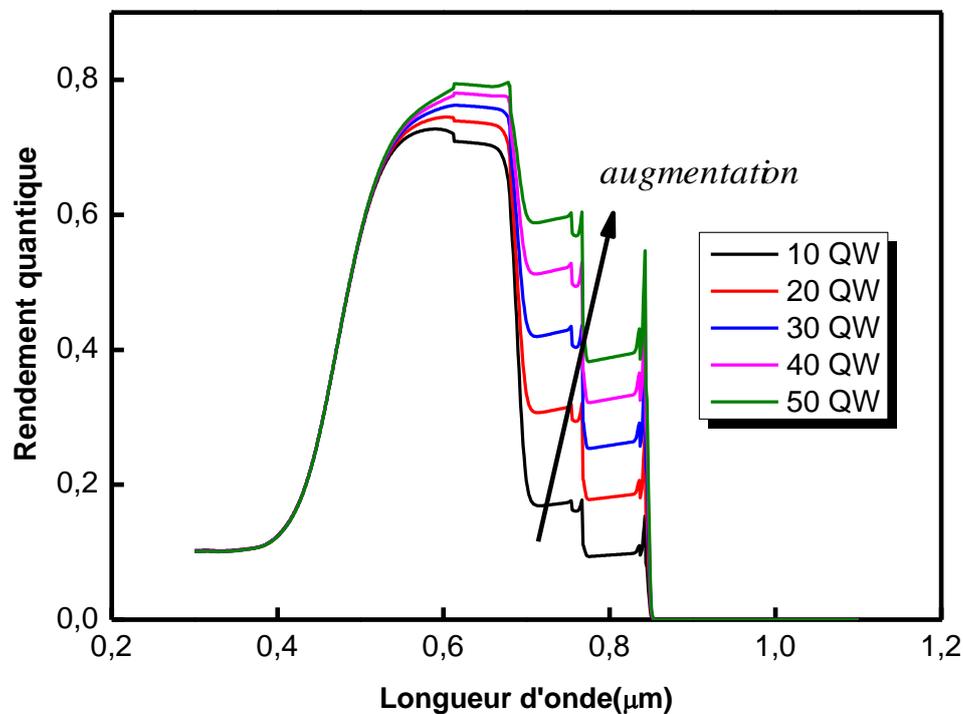


Figure IV.24 : Rendement quantique d'une cellule solaire pour différents nombres des puits quantiques.

Le tableau (IV.6) représente les variations des paramètres de sortie avec l'augmentation des nombre des puits quantique inséré à la région intrinsèque :

Tableau IV.6 : Effet du nombre des puits quantiques sur les paramètres de sortie de la cellule solaire.

Nombre des puits	J_{sc} (mA/cm^2)	$V_{oc}(V)$	$FF\%$	$\eta\%$
10 QW	18.70	1.14	82.45	17.58
20 QW	20.52	1.11	82.03	18.68
30 QW	22.02	1.10	81.27	19.69
40 QW	23.28	1.08	81.73	20.55
50 QW	24.32	1.07	81.67	21.26

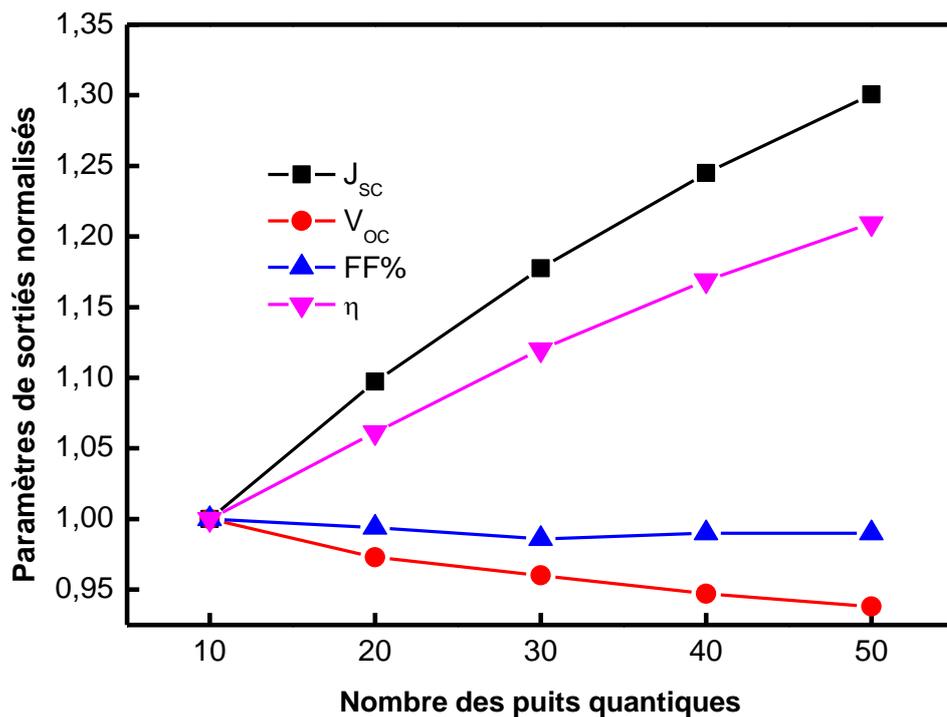


Figure IV. 25 : Effet du nombre des puits quantiques sur les paramètres de sortie de la cellule solaire.

A partir des résultats obtenus (le tableau IV.6 et la figure IV.25), les deux paramètres de sortie J_{sc} et η de la cellule solaire augmentent avec l'augmentation du nombre des puits quantique insérer dans la région intrinsèque. On remarque que le circuit-ouvert est diminué,

tandis que FF presque inchangeable. L'équation (I-33) peut expliquer La variation des paramètres de sortie de la cellule, à savoir J_{sc} .

IV. 10 Effet de la température sur la cellule solaire G951-ARC

On peut observer l'effet de la température sur la caractéristique (J-V) .Comme le montre la figure (IV.26), la température a un léger effet sur le courant, mais une augmentation de la température cause une diminution apparente sur la tension de circuit ouvert.

Le tableau (IV.7) montre l'évolution avec la température de la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le courant de court-circuit (I_{cc}), le facteur de forme (FF) et le rendement de la conversion photovoltaïque (η).

Tableau IV.7 : Effet de la température sur les paramètres de sortie de la cellule solaire.

Température	J_{sc} (mA/cm ²)	V_{oc} (V)	FF%	η %
00 °C	24.61	1.10	82.52	22.34
20 °C	24.39	1.08	81.72	21.52
40 °C	24.28	1.06	80.90	20.82
60 °C	24.23	1.05	79.31	20.18
80 °C	24.23	1.03	78.45	19.58

Sur les courbes caractéristiques J-V de la cellule (figure IV.26) on remarque une légère diminution dans le photocourant, cela est dû, d'une part à la diminution de la bande interdite des barrières, et d'une autre part à diminution du courant J_n et J_p (QE_n et QE_p) à cause de la variation de la mobilité des paires électron-trou avec la température (tableau IV.1).

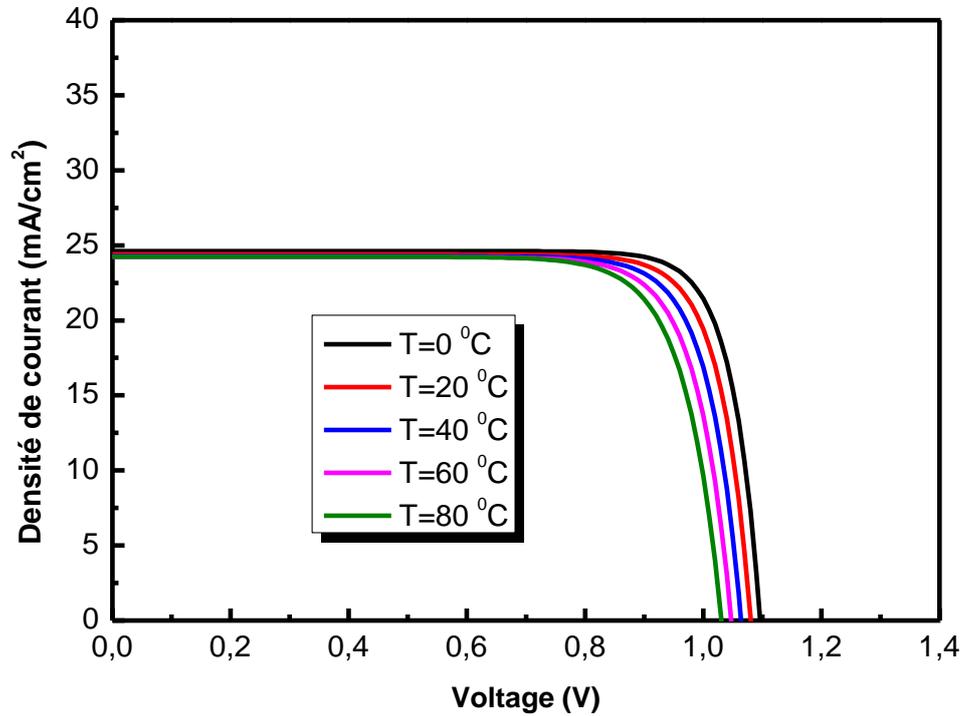


Figure IV.26 : Influence de la température sur (J-V).

La réponse spectrale simulée (efficacité quantique externe à polarisation nulle) pour ces cellules a été déterminée au sous ensemble des températures. La figure (IV.27) montre rendement quantique simulé avec l'augmentation de la température, on remarque une légère augmentation dans les longueurs d'ondes les plus longue et une diminution dans les courtes longueurs d'ondes.

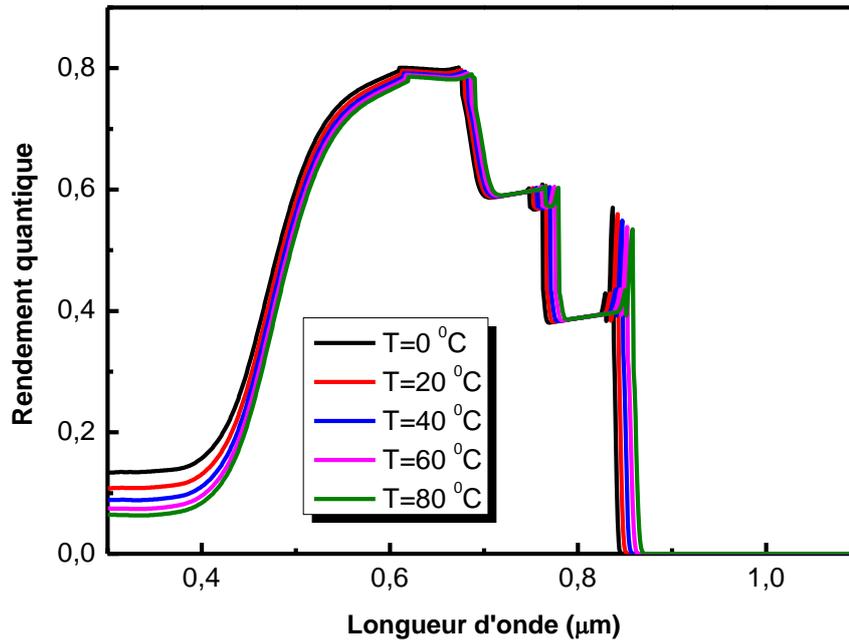


Figure IV.27 : Influence de la température sur le rendement quantique de la cellule solaire.

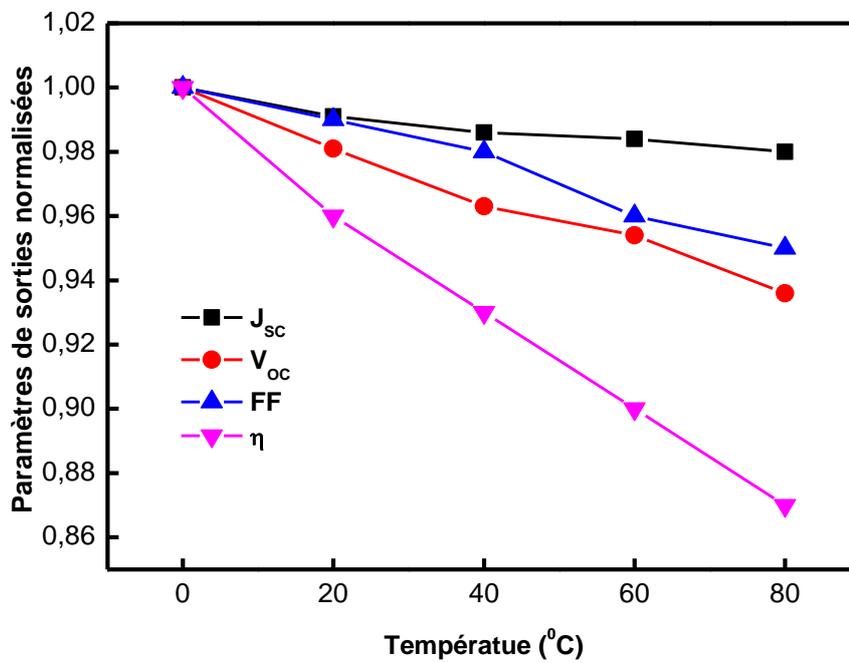


Figure IV.28 : Influence de la température sur les paramètres de sortie de la cellule solaire.

A partir des résultats obtenus (figure(IV.28)), les paramètres de sortie de la cellule solaire diminue avec l'augmentation de la température, ou le rendement est les plus effectué puis le circuit ouvert, tandis que FF et Jsc est diminué légèrement.

IV.11 Effet de largeur de la barrière sur la cellule solaire G951-ARC

Dans cette section, on a étudié l'effet de la largeur des barrières. La figure (IV.29) montre les caractéristiques J-V simulées lorsque la largeur de la couche de la barrière est réduite de 6 à 1nm. Les paramètres de sortie extrais sont présentés dans le tableau (IV.8) :

Dans la figure (IV.29), on remarque que la diminution des largeurs des barrières permet une légère amélioration du rendement quantique dans la gamme des longueurs d'onde 0.67 jusqu'à 0.88 μm .

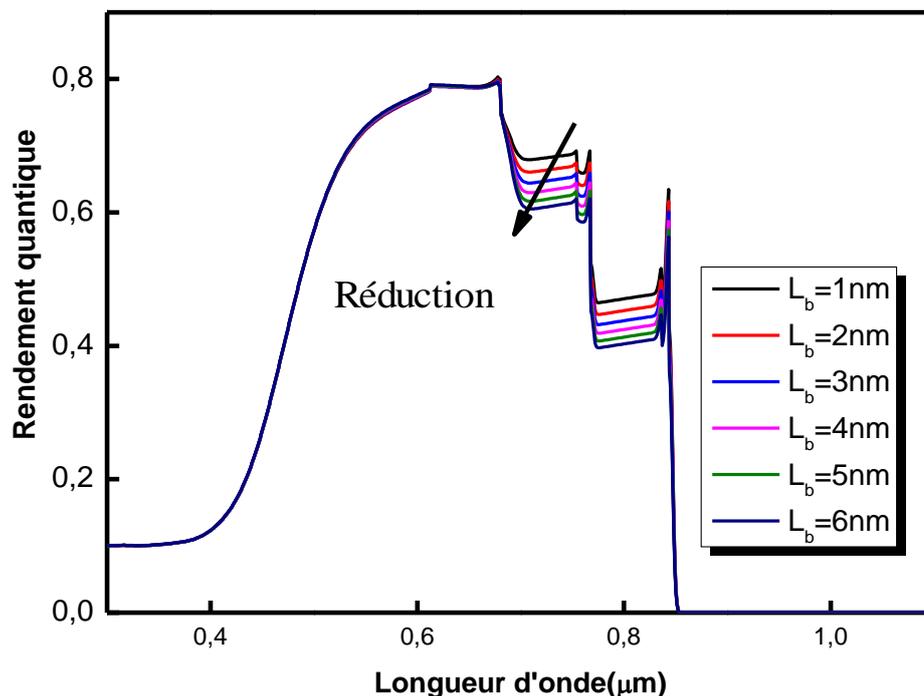


Figure IV.29 : Rendement quantique en fonctions d'onde par différentes largeur de puits quantiques.

La figure (IV.30) montre une légère diminution du court-circuit avec l'augmentation de largeur des barrières dans la cellule solaire.

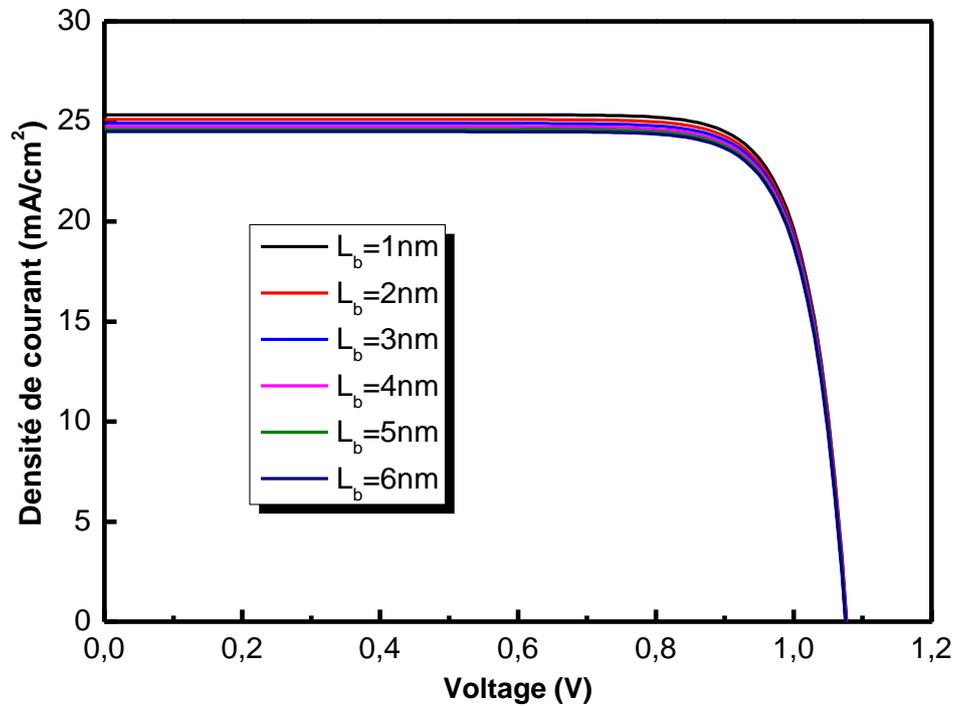


Figure IV.30 : Effet de largeur des barrières sur les caractéristiques (J-V)

Le tableau (IV.8) et la figure (IV.31) représentent les variations des paramètres de sortie avec l'augmentation des largeurs des barrières dans la cellule solaire :

Tableau IV.8 : Influence des largeurs des barrières sur les paramètres de sortie.

Largeur de la barrière L_b	J_{sc} (mA/cm^2)	V_{oc} (V)	$FF\%$	$\eta\%$
1nm	25.33	1.08	81.08	22.18
2nm	25.09	1.08	81.04	21.96
3nm	24.89	1.08	81.01	21.78
4nm	24.73	1.08	80.98	21.63
5nm	24.60	1.08	80.96	21.51
6nm	24.48	1.08	80.94	21.40

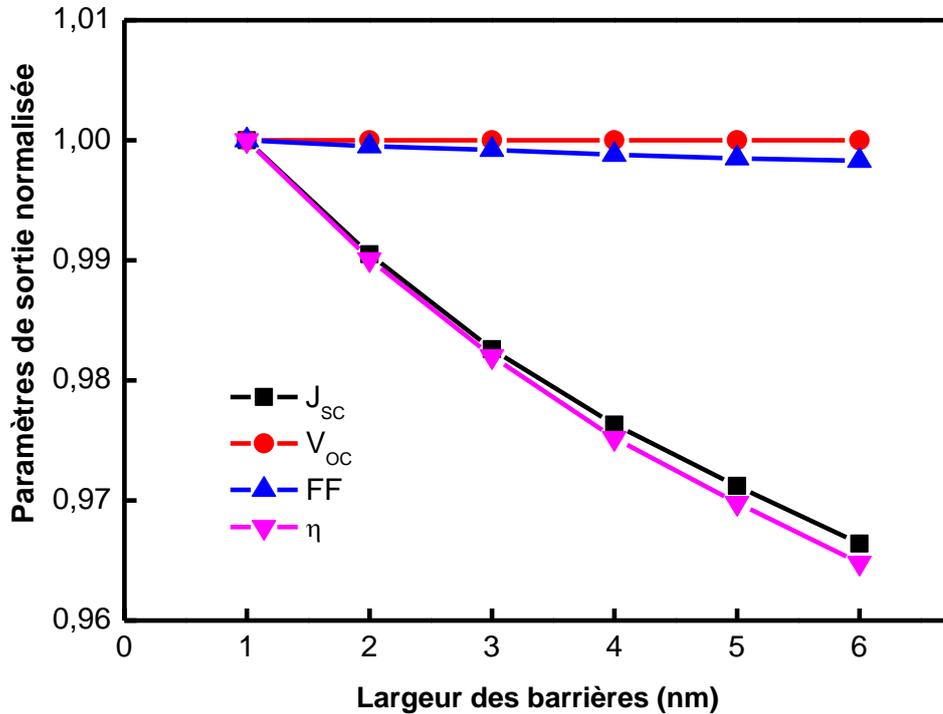


Figure IV.31 : Influence des largeurs des barrières sur les paramètres de sortie.

Dans le tableau (IV.8), on a constaté que tous les paramètres de la cellule (J_{cc} , V_{co} , FF et η) diminuent jusqu'à la valeur de 6 nm (largeur des barrières),

La figure (IV.31) montre que le circuit-ouvert et le facteur de forme les moins affectés, Ainsi, le rendement quantique et le court-circuit diminuent sensiblement.

IV.12 Effet de la largeur des puits sur la cellule solaire G951-ARC

La figure (IV.32) montre l'effet de la largeur du puits quantique sur les caractéristiques (J-V) pour deux profondeurs du puits. Nous observons que l'augmentation de la largeur du puits quantique de 1 à 10 nm est amélioré le courant du court-circuit et cette amélioration est plus prononcée pour les puits plus profonds, ceci est conséquence de la nature quantique de l'absorption des photons dans les puits. Dans la cellule de barrières moins profondes, le nombre de niveaux d'énergies ne change pas significativement avec l'augmentation de la largeur du puits quantique. Par contre, pour les profondeurs des barrières plus importantes, le nombre des niveaux d'énergies et la quantité des transitions augmentent avec l'augmentation de la

largeur du puits quantique entraînant une absorption plus importante des photons incidents et donc une augmentation de la densité de court-circuit.

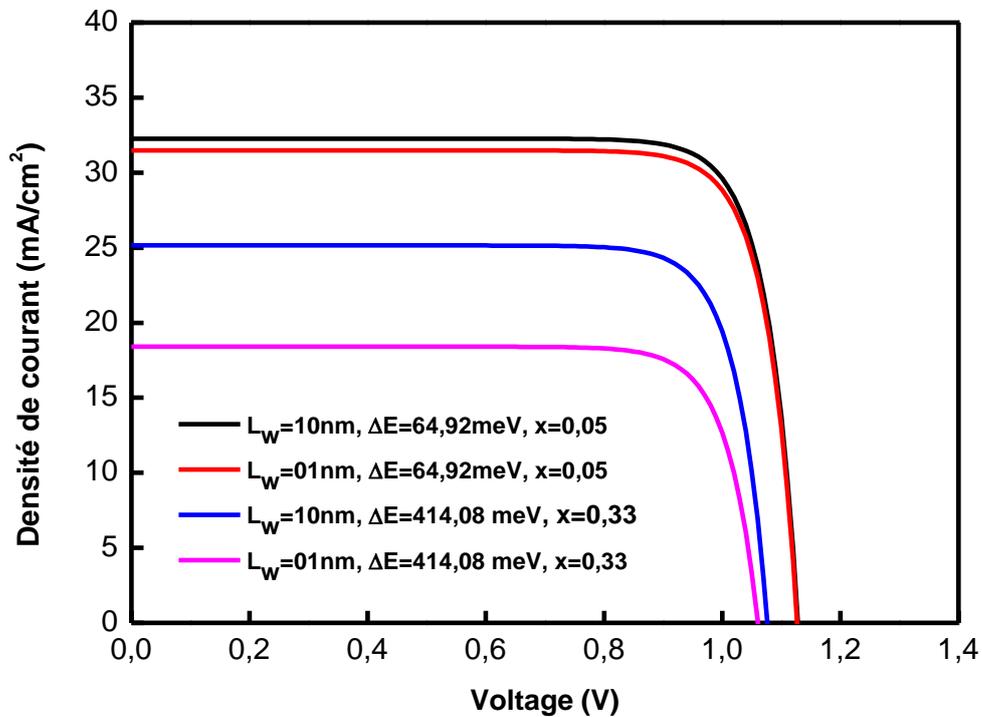


Figure IV.32 : Influence des largeurs et des profondeurs des puits quantique sur $J(V)$.

Dans la figure (IV.33), nous comparons les niveaux d'énergies pour deux largeurs des puits quantique et avec les mêmes profondeurs des puits, ou nous avons observé une augmentation du nombre des niveaux d'énergies qui varié de un à trois dans la bande de conduction et de deux à trois dans la bande de valence ce qui augmente les nombre des transitions ou bien le coefficient d'absorption de la cellule.

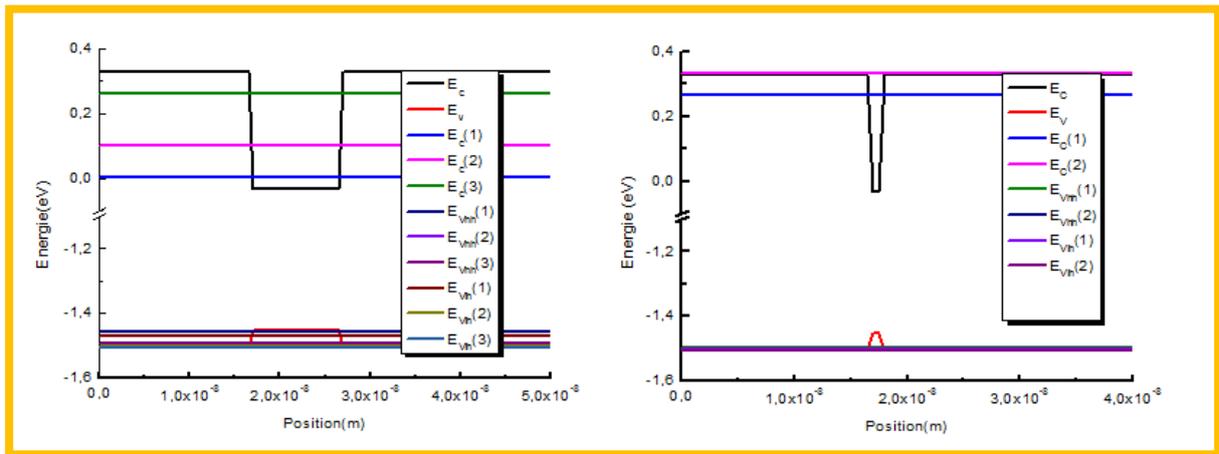


Figure IV.33 : Énergie des niveaux confinés dans un puits quantique de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$, avec largeur de puits 10 nm à gauche et 1nm à droite.

La figure(IV.34) montre qu’il n’y a pas de changement significatif dans les nombres des niveaux d’énergies lorsque les largeurs des puits sont augmentées. Dans ce cas, on peut dire que la profondeur des puits a la plus fluctuation sur les niveaux d’énergies et donc sur le coefficient d’absorption et le rendement quantique.

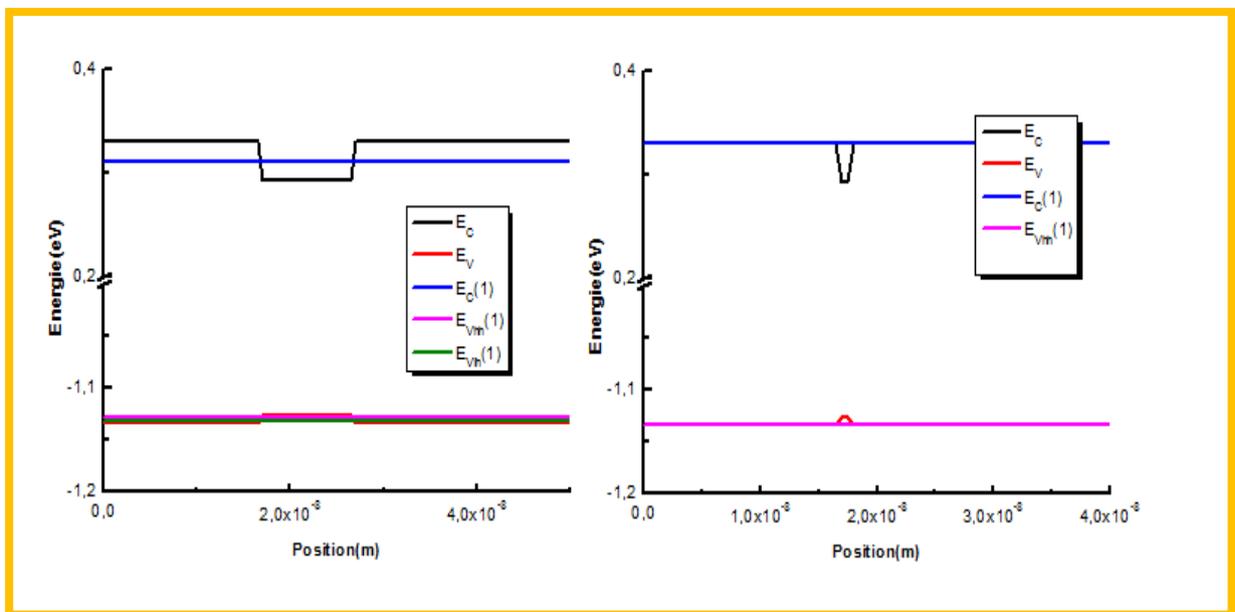


Figure IV.34 : Énergie des niveaux confinés dans un puits quantique de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$, avec largeur de puits 10 nm à gauche et 1nm à droite.

Dans le tableau (IV.9), on a constaté que tous les paramètres de la cellule (J_{sc} , V_{oc} , FF et η) sont varié, ce changement est évident à $\Delta E = 414.08$ meV.

Tableau IV.9 : Effet de largeur et de profondeur des puits sur les paramètres de sortie de la cellule solaire.

Profondeur et largeur des puits	$J_{sc}(mA/cm^2)$	$V_{oc}(V)$	$FF\%$	$\eta\%$
$\Delta E = 414.08$ meV, 10 nm	25.14	1.08	81.05	22.01
$\Delta E = 414.08$ meV, 01 nm	18.40	1.06	81.16	15.83
$\Delta E = 64.29$ meV, 10 nm	32.26	1.13	81.89	29.86
$\Delta E = 64.29$ meV, 01 nm	31.48	1.13	80.80	29.10

IV.13 Effet de la concentration du dopage sur la cellule solaire G951-ARC

Dans cette partie, nous examinons l'effet de la concentration du dopage des régions p (l'émetteur) et de la base (n) sur les paramètres externes de la cellule est présenté dans la figure (IV.35) et le tableau (IV.10). Nous faisons alors varier la valeur du dopage de l'émetteur et de base entre 10^{15} et 10^{18} cm^{-3} .

Tableau IV.10 : Effet de la concentration de région émetteur et de base sur les paramètres de sortie de la cellule solaire.

Dopage des régions n et p (cm^{-3})	J_{sc} (mA/cm^2)	$V_{oc}(V)$	$FF\%$	$\eta\%$
10^{15}	27.66	1.08	81.50	24.35
$1 \cdot 10^{16}$	27.33	1.08	81.45	24.08
10^{17}	26.42	1.08	81.29	23.19
$5 \cdot 10^{17}$	25.32	1.08	81.08	22.18
10^{18}	24.64	1.08	80.97	21.55

Les résultats obtenus dans le tableau (IV.10) et la figure (IV.35) indiquent l'effet de l'augmentation à la concentration du dopage de la région p (l'émetteur) et de la base (n) sur les paramètres externes. On remarque une diminution dans J_{sc} de 27.66 à 24.64 mA/cm^2 et dans le

rendement de 24.35 jusqu'à 21.55, FF reste presque inchangé, on remarque aussi que le circuit ouvert ne change pas avec le changement de la concentration.

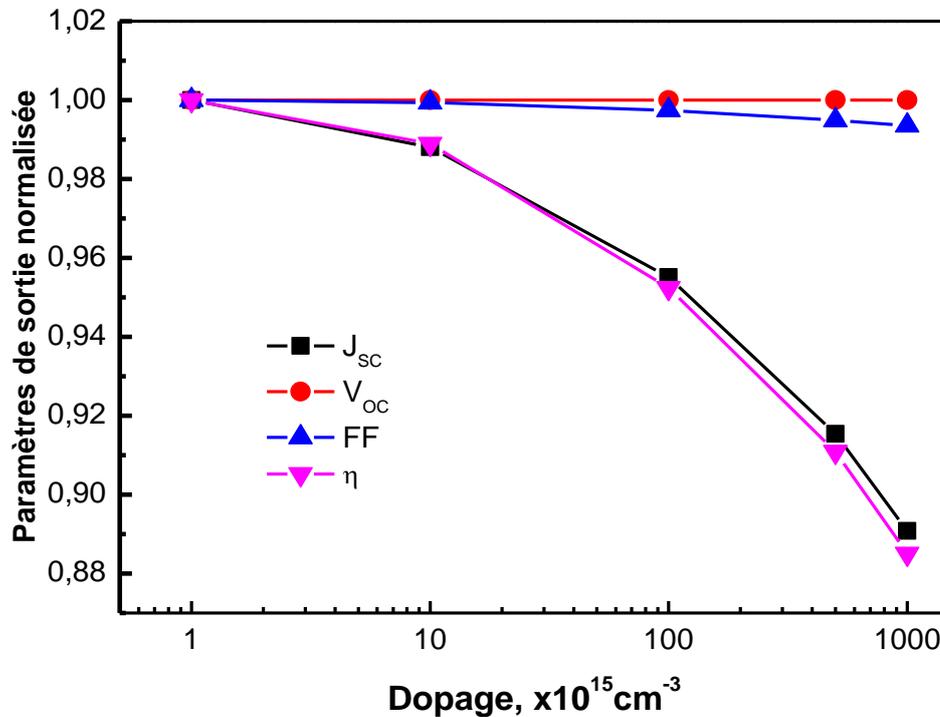


Figure IV.35 : Effet de la concentration du dopage de l'émetteur et de base sur les paramètres de sortie.

Dans les figures (IV.36) et (IV.37) montrent que les caractéristiques électriques de la cellule sont légèrement sensibles à la variation du dopage pour une variation de ce dernier entre 10¹⁵ et 10¹⁸ cm⁻³. L'amélioration du rendement quantique est remarquable pour les courtes longueurs d'ondes qui suivent les faibles dopages de l'émetteur et de base. Les variations dans les mobilités des porteurs de charge et les longueurs de diffusion avec le dopage (tableau (IV.1)) provoquent une variation dans le rendement quantique.

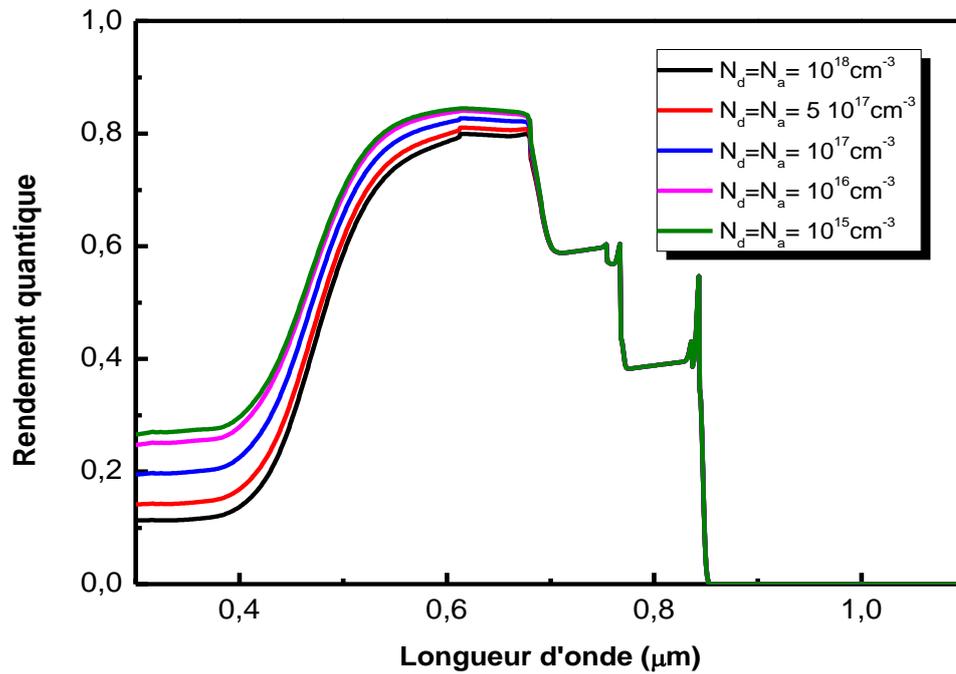


Figure IV.36 : Effet de la concentration du dopage de l'émetteur et de base sur le rendement quantique.

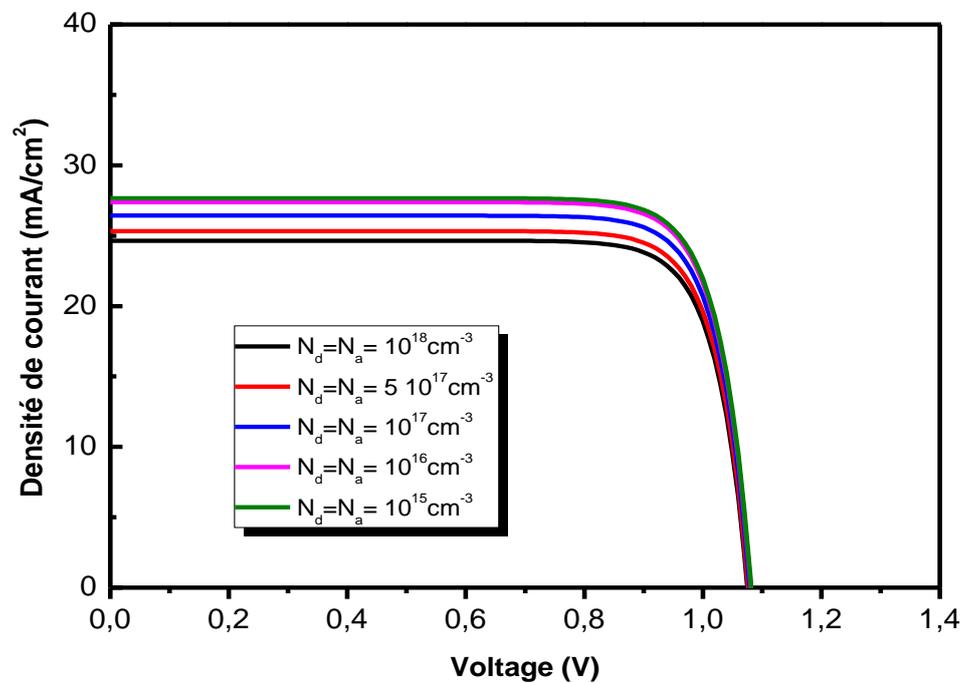


Figure IV.37 : Effet de la concentration du dopage de l'émetteur et de base sur les caractéristiques (J-V).

IV.14 Effet du taux de recombinaison superficielle v_s sur la cellule solaire G951-ARC

Quand augmente des nombres des puits quantiques dans la zone intrinsèque ; L'absorption, le photocourant et les recombinaisons dans les interfaces s'élargissent, mais l'augmentation de ce dernier s'entraînant une diminution de la tension de circuit ouvert. Pour cette raison, il est nécessaire d'examiner l'effet du taux de recombinaison superficielle v_s sur les paramètres de sortie de la cellule.

La figure (IV.38) montre la caractéristique J-V lorsque le taux de recombinaison superficielle augmente de 30 jusqu'à 300 cm/s. les paramètres de sortie sont résumé dans le tableau (IV.11) et présentés graphiquement dans la figure (IV.39).

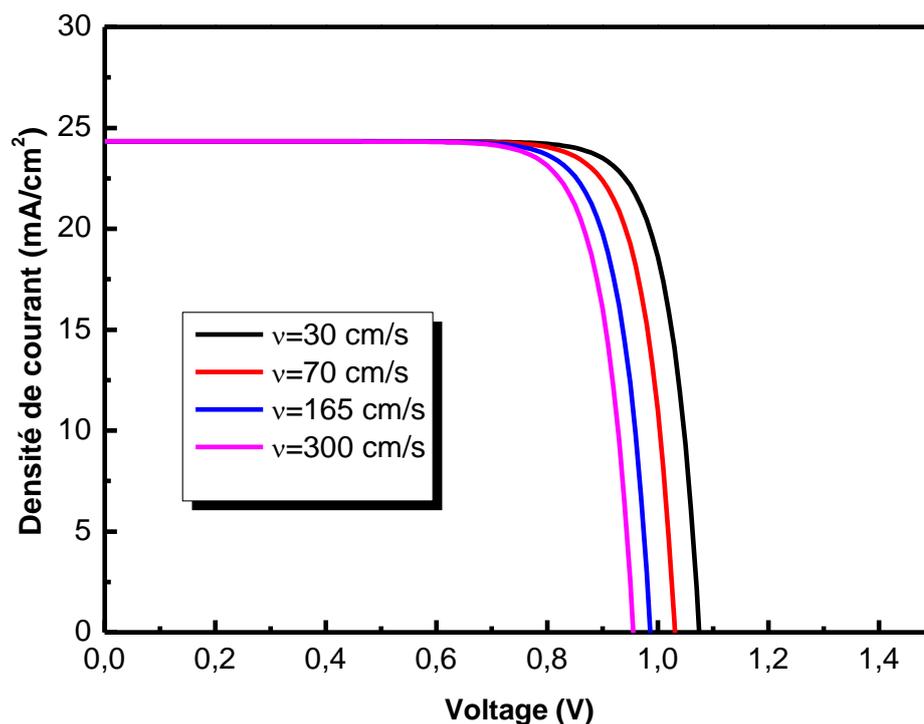


Figure IV.38 : Effet de la recombinaison d'interface puits-barrière sur les caractéristiques (J-V) de la cellule.

Tableau IV.11 : Effet de la recombinaison d'interface puits-barrière sur les paramètres de sortie de la cellule.

La vitesse de recombinaison cm/s	J_{sc} (mA/cm^2)	$V_{oc}(V)$	$FF\%$	$\eta\%$
30	24.32	1.07	81.67	21.26
70	24.32	1.03	80.82	20.25
165	24.32	0.99	79.86	19.23
300	24.32	0.96	79.33	18.52

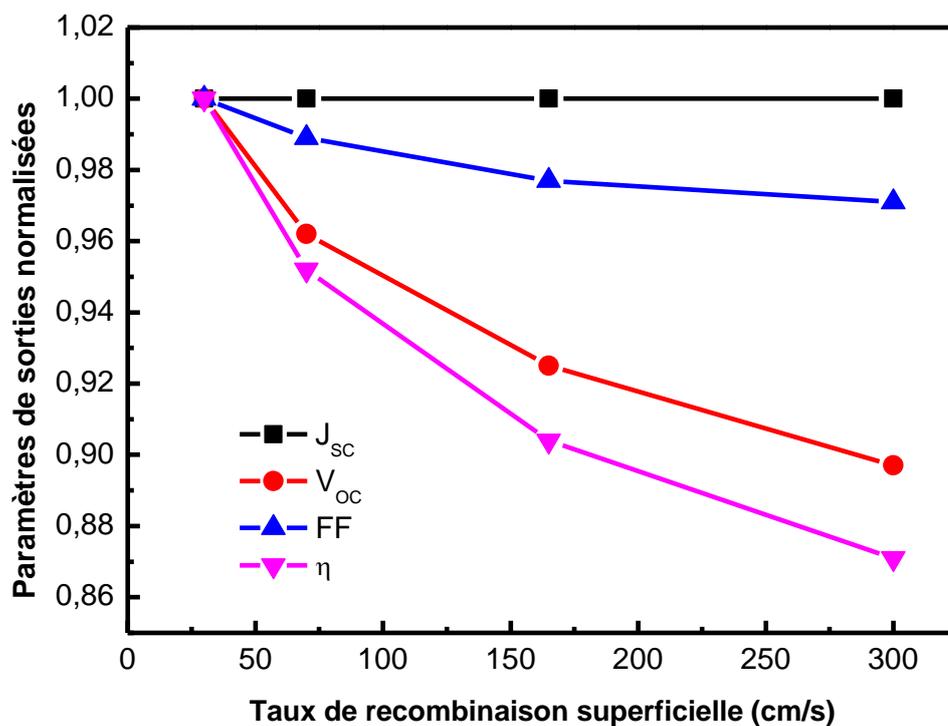


Figure IV.39 : Effet du taux de recombinaison superficielle puits-barrière sur les paramètres de sortie de la cellule.

Les résultats obtenus dans les figure (IV.38), (IV.39) et le tableau (IV.11) indiquent une légère diminution de FF lorsque le taux de recombinaison superficielle augmente, J_{sc} semble être étonnamment insensible aux recombinaisons de l'interface, V_{oc} diminue de 1.07 à 0.96, et la diminution de rendement est suivie les variations de circuit ouvert jusqu'à 21.26%.

Nous terminons cette section par l'examen de l'effet de la bande interdite dans les barrières pour trois taux de recombinaison superficielle sur l'efficacité de cellule solaire. La figure (IV.40) montre lorsque la bande interdite est diminué le rendement augmente jusqu'à 29.35 à $E_B=1.55$ eV.

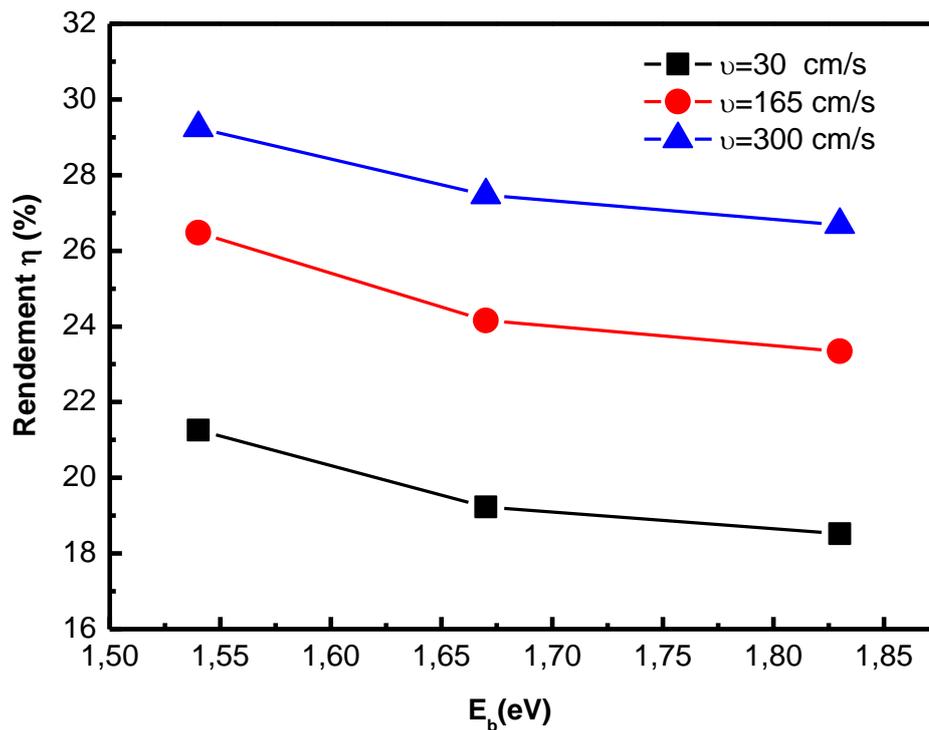


Figure IV.40 : Dépendance de conversion de la cellule pour différents taux de recombinaison superficielle sur l'énergie band gap dans les barrières.

IV.15 Cellule solaire à multi puits quantiques modulée :

Après les optimisations et les modélisations des paramètres technologiques et géométriques de la cellule solaire ce que nous avons fait, nous choisissons les paramètres plus importants qui améliorent le perfectionnement de la cellule, puis en a obtenu une nouvelle cellule solaire avec la caractéristique courant-tension comme représenté sur la figure (IV.41) :

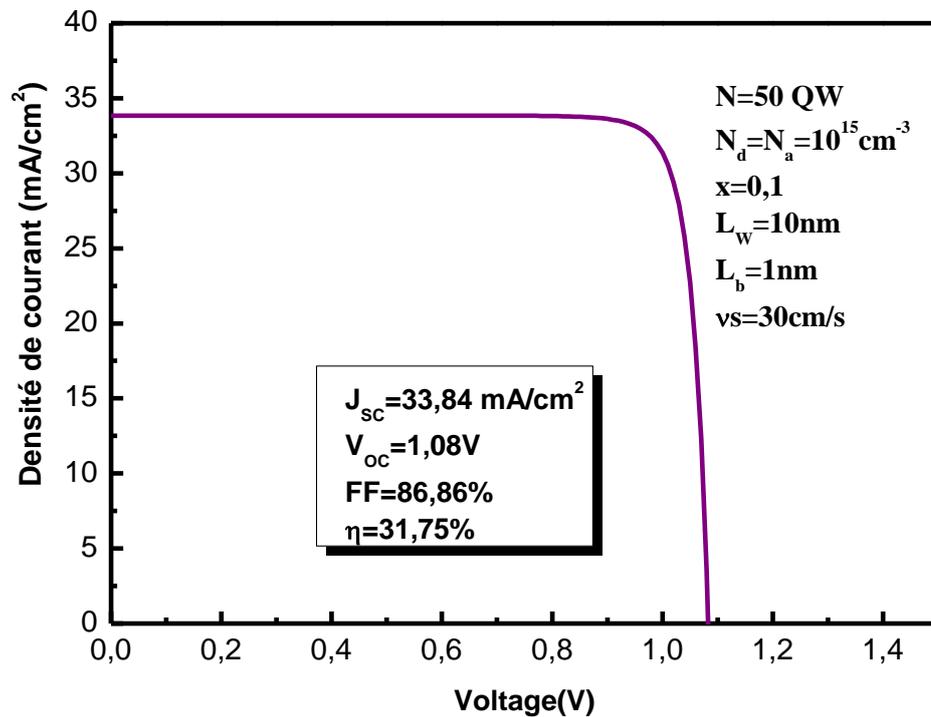


Figure IV.41 : Caractéristique (J-V) de la cellule solaire modelée.

IV.16 Conclusion

Dans ce chapitre, on a étudié l'influence de l'introduction des puits quantiques de GaAs à l'intérieur de la région intrinsèque d'une cellule solaire pin à base d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ sur le perfectionnement de ses paramètres caractéristiques. La tension en circuit ouvert, la densité de court-circuit, le facteur de forme et le rendement quantique ont été calculé en fonction des fractions molaires d'Al dans les barrières, de la largeur et de la profondeur du puits, du nombre des puits dans la région intrinsèque et taux de recombinaison superficielle entre les puits et les barrières...ect. Après la simulation, on a constaté qu'un effet considérable sur les paramètres de sortie de la cellule a été obtenu avec la variation du nombre du puits, de sa profondeur et de sa largeur, des hauteurs des barrières (via la fraction molaire d'Al), et du taux de recombinaison superficielle. Les densités de dopage, cependant pour les régions émetteur et de collecteur ont un léger effet. L'efficacité cellulaire optimisée a atteint 32% qu'on taux de recombinaison superficielle plus faible de 30 cm/s et avec l'introduction de 50 puits quantiques dans la région intrinsèque.

*Conclusion
générale*

Conclusion générale

L'amélioration des performances de la cellule solaire, principalement son rendement de conversion, avec réduction de son coût de production est l'objectif majeur des recherches photovoltaïques. Par ailleurs, beaucoup de recherches concernent actuellement des cellules photovoltaïques à semi-conducteurs impliquant des cristallites de taille nanométriques (puits quantiques). L'objectif étant d'approcher le rendement théorique en réduisant les pertes par thermalisation et par recombinaison.

Le professeur Keith Branham a été proposé une nouvelle structure qui est la cellule solaire à puits quantiques QWSCs (Quantum Well Solar Cells) à haut rendement en 1990. Les puits quantiques sont des couches très minces d'un matériau à faible énergie de bande interdite (BI) dans un matériau à grande énergie de BI. Ceci étend l'absorption de la cellule en dessous de l'énergie gap du matériau massif tout en gardant les propriétés du courant sous obscurité correspondant à une énergie de gap entre celle du puits et du matériau massif. La conséquence directe est une plus grande collecte et un fort courant de génération. Le deuxième avantage est une réduction des processus de recombinaison due au plus faible courant sous obscurité, d'où une meilleure tension de circuit-ouvert. Des simulations et expériences ont montrées que les porteurs peuvent traverser une région QW sans thermalisme dans le puits, c'est à dire sans être capturés. Dans ce type de cellule, le photocourant et la tension de sortie peuvent être optimisés indépendamment. En effet, le seuil d'absorption et les caractéristiques spectrales peuvent être ajustés par la largeur et la profondeur du puits, alors que la tension de sortie est plutôt déterminée par la grande bande interdite du matériau massif.

Dans ce travail, nous avons développé un programme de simulation par la méthode de volume finis. Cette méthode consiste à subdiviser le domaine d'étude (dans notre cas est une cellule solaire) en volumes élémentaires de telle manière que chaque volume entoure un nœud principal. Chaque volume est délimité par : deux interfaces, Chaque nœud principal est limité par des nœuds voisins dans le cas unidimensionnel. Les équations différentielles : Schrödinger, poisson et l'équation de continuité sont intégrée dans chaque volume élémentaire finis. Pour calculer l'intégrale dans ce volume élémentaire l'inconnue est représentée à l'aide d'une fonction d'approximation (linéaire, parabolique, exponentielle, de puissance etc.) entre deux nœuds consécutifs. Ensuite, la forme intégrale est discrétisée dans le domaine d'étude. Le résultat de discrétisation donne une équation algébrique qui est constituée par les valeurs nodales.

Généralement nous acceptons que l'introduction des puits quantiques dans les cellules solaires améliore leur performance. Le sujet traité dans cette thèse est de mettre en évidence cette amélioration d'une manière quantitative. Cette étude comporte deux phases de calcul ; la première concerne la résolution des équations de Poisson-Schrödinger couplés pour un puits quantique. A partir de ces solutions les états énergétiques liés des électrons et trous sont déterminés (bandes de valence et de conduction). La détermination du coefficient d'absorption est ainsi obtenue.

La deuxième phase examine la modélisation d'une cellule solaire de structure : p-i(MWQ)-n ou les puits quantiques sont insérés dans la région intrinsèque(i). Le matériau utilisé dans cette étude est l' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, ce matériau est choisi essentiellement à cause de la possibilité d'ajuster la fraction molaire x pour obtenir des hauteurs de puits différentes.

Dans ce thèse, nous examinerons les paramètres externes de la cellule solaire à multi puits quantiques à base d' $\text{AlGaAs}/\text{GaAs}$ sous l'irradiation AM 1.5 G telles que : la densité de courant, la tension de circuit ouvert, le facteur de remplissage et le rendement, et étudier, par la suite, la caractéristique J-V et la réponse spectrale. Pour aboutir une efficacité de conversion idéale d'une cellule solaire, on a fait varier plusieurs paramètres à savoir : le dopage de l'émetteur et de base, la température et l'utilisation d'une couche antireflet.

Les résultats obtenus montrent que le photocourant et le rendement dans la cellule à structure à puits quantique sont plus importants que ceux d'une cellule à jonction pin, et que les différents paramètres géométriques (hauteur, largeur et nombre...), et environnementaux (température) jouent un rôle important.

On résumé quelques résultats de nos simulation comme suit :

- L'utilisation d'une couche antireflet dans une cellule multi puits quantique améliore tous les paramètres de sortie.
- Quand augmente la fraction molaire dans les barrières tous les paramètres de sortie sont diminués.
- L'effet des largeurs des barrières sur les paramètres de sortie d'une cellule solaire à puits quantique est négligeable.
- Les deux paramètres de sortie J_{SC} et η de la cellule solaire augmentes avec l'augmentation nombre des puits quantique insérés dans la région intrinsèque, mais la tension en circuit-ouvert est diminuée, dans ce cas la diminution dans la tension en circuit-ouvert compense par l'augmentation considérée en court-circuit.

Références

Références

- [1] International Energy Agency (IEA): KEY WORLD ENERGY STATISTICS.
- [2] R. Mosseri, C. Jeandel, «L'énergie à découvert », CNRS Editions, 352 pages, mars 2013.
- [3] R. Lachaume, «Contribution à la caractérisation électrique et à la simulation numérique des cellules photovoltaïques silicium à hétérojonction », Thèse Doctorat, Nano Electronique et Nano Technologies (NENT), Université de Grenoble, 2014.
- [4] A. M. Green, «Silicon Solar Cells: Advanced Principles and Practice », Centre for Photovoltaic Devices and Systems, University of New South Wales, 366 pages, 1995.
- [5] <http://www.sc.ic.ac.uk/>
- [6] http://www.sc.ic.ac.uk/q_pv/publications/overview/index.htm ; Electronics Weekly, press release, 02/03/05.
- [7] <http://www.electronicweekly.co.uk>.
- [8] K. Mertens, «Photovoltaic: fundamentals, technology and practice», First Edition. John Wiley & Sons Ltd, ed., United Kingdom, Print length 294 pages. 2014.
- [9] W. Shockley, «The theory of pn junctions in semiconductors and p-n-junction transistors», Bell System. Technical Journal, 28(3), pp.435–489, July 1949.
- [10] D. M. Chapin, C.S. Fuller, and G.L Pearson, « A new silicon p-n junction photo-cell for converting solar radiation into electrical power». Journal of Applied Physics, 25(5), pp.676–677, 1954.
- [11] M. Green, «Solar cell efficiency tables (version 49) », Progress in Photovoltaics: Research and Applications, 25(4), pp.333–334, (2017).
- [12] NREL, 2016. efficiency_chart.jpg (4348×2415). Available at: https://www.nrel.gov/pv/assets/images/efficiency_chart.jpg. [Accessed April 12, 2017].
- [13] A. Labouret, M. Viloz, «énergie solaire photovoltaïque», 3^{ème} Edition, Dunod, Le Moniteur, Technique et ingénierie-Environnement et sécurité, 352 pages, 2006.
- [14] www.nationalgeographic.com/content/dam/science/pho
<http://www-istp.gsfc.nasa.gov/istp/outreach/images/Solar/Events/erupt2.jpg>.
- [15] F. Rothen, «Aux limites de la physique : les paradoxes quantiques », PPUR Presses polytechniques et universitaires romandes, Focus Sciences, 286 pages, 2012.
- [16] D. C. Giancoli, «Physique générale : Onde, optique et physique moderne», De Boeck Supérieure, Science- 488 pages, 1993.

Références

- [17] <https://rredc.nrel.gov/solar/spectra/am1.5/>
- [18] B. Brousse, « Réalisation et caractérisation des cellules photovoltaïques organiques obtenus par dépôt physique. » Thèse Doctorat en électronique des hautes fréquences et optoélectronique, Université de Limoges (2004).
- [19] G. K. Vijaya, «III-V DILUTE NITRIDE MULTI-QUANTUM WELL SOLAR CELLS FOR HIGH EFFICIENCY PHOTOVOLTAICS» Thèse Doctorat, the Faculty of the Department of Physics University of Houston, December 2014.
- [20] C. A. Gueymard, «Direct solar transmittance and irradiance with broadband models Part I: detailed theoretical performance assessment». *Solar Energy*, 74, pp.355–379 (2003).
- [21] C. A. Gueymard, D. Myers, «Solar resources for space and terrestrial applications». In L. Fraas & L. Partain, eds. *Solar Cells and their Applications*. A John Wiley & sons, inc, pp. 427–461 (2010).
- [22] C.A. Gueymard, «Parameterized transmittance model for direct beam and circumsolar spectral irradiance», *Solar Energy*, 71(5), pp.325–346 (2001).
- [23] H. P. Garg, J. Prakash, « Solar Energy Fundamentals and Applications», first edition, Tata McGraw-Hill Publishing Limited New Delhi, 414 pages, 2006.
- [24] H. Mathieu H. Fanet, «Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques », 6^{ème} édition, Science sup, 830 pages, Dunod, juillet 2009.
- [25] W. Shockley, W. T. Read, «Statistics of the Recombination of Holes and Electrons», *Physical Review*, 87(46), issue 5, pp.835–842, 1952.
- [26] R. N. Hall, «Electron-hole recombination in germanium», *Physical Review* 87, Issue2, pp.387-387, 1952.
- [27] O. Nichiporuk, « Simulation, fabrication et analyse de cellules photovoltaïques à contacts arrières interdigités », Thèse Doctorat de l'institut national des sciences appliquées de Lyon (2005).
- [28] G. Conibeer, «Third generation photovoltaic, *Materials Today*», Elsevier 10 (11), pp. 42-50, 2007.
- [29] P. Fath, C. Borst, C. Zechner, E. Bucher, G. Willeke, S. Narayanan, « Progress in novel high-throughput mechanical texturization technology for highly efficient multicrystalline silicon solar cells», *Solar Energy Materials and Solar Cells* ,48, pp229-236, 1997.

Références

- [30] G. Conibeer, M. Green, R. Corkish, Y. Cho, E. Cho, C. Jiang, T. Fangsuwannarak, E. Pink, Y. Huang, T. Puzzer, «Silicon nanostructures for third generation photovoltaic solar cells- SAO/NASA ADS», *Thin Solid Films* 511-512 ,pp.654-662, 2006.
- [31] G.F. Brown, J. Wu, « Third generation photovoltaic », *Laser & Photonics Review* 3(4), pp.394-405, 2009.
- [31] A. V. Shah, « THIN-FILM SILICON SOLARS CELLS», 1st Edition, Engineering Science, EPFL Press A Swiss academic, 440 pages, 2010.
- [32] K.W.J. Barnham, G. Duggan, «A new approach to high-efficiency multi-band-gap solar cells», *J. Appl. Phys.* **67**, 3490–3493 (1990).
- [33] B.G. Kluftringer, «Numerical simulation and modeling of GaAs quantum-well solar cell», PhD thesis, University of London, Imperial College of Science, Technology, and Medicine, (2000).
- [34] M. Baldini, «MOVPE growth and study of III-V multi-junction structures for advanced photovoltaic applications», Thèse Doctorat, UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PARMA, 2007.
- [35] U. Aeberhard, «A Microscopic Theory of Quantum Well Photovoltaics », PhD thesis, INSTITUTE OF TECHNOLOGY ZURICH, 2008.
- [36] J. C. Rimada, L. M. Hernández, «Modeling of ideal AlGaAs quantum well solar cells», *Microelectronics Journal* 32 (2001) 719-723.
- [37] J. C. Rimada, L. M. Hernández, « A new approach to ideal AlGaAs MQW solar cells», *Modern physics letters B*, vol. 15, No.17n19, pp.778-781(2001).
- [38] S.J. Lade, A. Zahedi, «A revised ideal model for AlGaAs/GaAs quantum well solar cells», *Microelectronics Journal* 35 (2004) 401–410.
- [39] J. C. Rimada, 1, L. Hernandez, J. P. Connolly, and K. W. J. Barnham, «Quantum and conversion efficiency calculation of AlGaAs/GaAs multiple quantum well solar cells», *phys. stat. sol. (b)* 242, No. 9, 1842–1845 (2005).
- [40] N. G. Anderson, « Ideal theory of quantum well solar cells», *J. Appl. Phys.*, 78 (3), 1850-1861(1995).
- [41] G. Bastard, «Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures», Editions de Physique, Paris, 1988.
- [42] S. M. Sze, Kwok K. Ng, «Physics of semiconducteur Devices», Third Edition; John Wiley & Sons Inc, (1981).

Références

- [43] W. E. Huni, « Modélisation de cellules solaires multi-tandem bas coût et très haut rendement à base de nitrures des éléments III-V », Thèse de doctorat, Génie électrique et électronique, Université Paris-Saclay, 2016.
- [44] Y. Chen, « Investigation of generation – recombination noise and related processes in aluminium gallium arsenide TEGFET and Hall structures with quantum wells », Thèse, Génie électrique, université international de Florida, USA. 1998.
- [45] D.A. Neamen, « Semiconductor Physics and Devices - Basic Principles », Published by McGraw-Hill, ISBN 0-07-232107-5, New York, 2003.
- [46] S. Adachi, « GaAs, AlAs, and $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ Material parameters for use in research and device applications », J. Appl. Phys., vol. 58(3), pp. R1–R29, August 1985.
- [47] S. Tiwari and D.J. Frank, « Empirical fit to band discontinuities and barrier heights in III-V alloy systems », Appl. Phys. Lett., vol. 60(5), pp. 630-632, February 1992.
- [48] J. H. Davies, « The physics of low-dimensional semiconductors – an introduction », Cambridge university press, Technology & Engineering- 438 pages, 1998.
- [49] B. G. Yacobi, « Semiconductor Materials, an Introduction to Basic Principles », Kluwer academic publishers, University of Toronto, Canada, 228pages, 2003.
- [50] S. M. Sze, Kwok K. Ng, « Physics of Semiconductor Devices », Published by John Wiley & Sons. Technology & Engineering- 832 pages, 2006.
- [51] A. K. Saxena, « The conduction band structure and deep levels in $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ alloys from a high-pressure experiment » J. Phys. C: Solid State Phys., vol.13, pp. 4323-4334, 1980.
- [52] D. E. Aspnes, « GaAs lower conduction-band minima: Ordering and properties », Phys. Rev. B. vol.14, pp. 5331-5343, 1976.
- [53] Sheng S. Li, « Semiconductor Physical Electronics », University of Florida, USA, 690 pages, 2006.
- [54] S. Kayali, G. Ponchak, R. Shaw, « GaAs MMIC Reliability Assurance Guideline for Space Applications », JPL Publication 96-25, National Aeronautics and Space Administration, Jet Propulsion Lab., California Inst. of Technology Pasadena, California, 221pages, 1996.
- [55] E. F. Schubert, A. Fischer, and K. Ploog, « Electron-impurity tunneling in selectively doped n-type $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ heterostructures », Phys. Rev. B, vol. 31, pp. 7937-7946, 1985.
- [56] D. A. B. Miller, D. S. Chemla, T. C. Damen, A.C. Gossard, W. Wiegmann, T.H. Wood, A.C. Burrus, « Electric field dependence of optical absorption near the band gap of quantum-well structures », Phys. Rev. B., vol. 32, pp. 1043-1060, 1985.

Références

- [57] D. Courjon, C. Bainier, «Le champ proche optique théorie et applications», Collection technique et scientifiques des télécommunications, page 269, 2001.
- [58] A. Kongkanand, K. Tvrđy K, K. Takechi, K. M. Kuno, P.V. Kamat, «Quantum Dot Solar Cells. Tuning Photoresponse through Size and Shape Control of CdSe-TiO₂ Architecture», J. Am. Chem. Soc, 130: 4007-4015, (2008).
- [59] A. Champagne, «Modélisation des lasers InGaAsP-InP à double hétérostructure et à double région active», Thèse Ph.D., Université de Montréal, 1992.
- [60] U. Serincan, «Formation of Semiconductor Nanocrystals in SiO₂ by Ion Implantation», Ph .D thesis, Middle East Technical University, Ankara, Turquie (2004).
- [61] L. Esaki, R. Tsu, «Super lattice and negative differential conductivity in semiconductors», IBM J. Res. Develop. 14:61-5, 1970.
- [62] R. Dingle, H. L. Störmer, A. C. Gossard , W. Wiegmann, «Electron motilities in modulation doped semiconductor heterojunction superlattices», Appl. Phys. Lett.33,655,1978.
- [63] G.P. Agrawal, N.K. Dutta, «Long Wavelength Semiconductor Lasers», Van Nostrand Reinhold (Electrical/Computer Science and Engineering Service), Science-473 pages, New York, 1986.
- [64] C. Weisbuch, «Semiconductors and Semimetals: applications of Multi quantum Wells, Selective Doping, and Superlattices», Volume 24, volume editor R.DINGLE, Academic Press, 1987.
- [65] D. S. Chemla, D. A. B. Miller, «In Heterojunction B and Discontinuities: Physics and Devices Applications», Eds. F. Capasso and G. Margaritondo (North Holland, Amsterdam), 652 pages, 1987.
- [66] J. P. Pocholle, «Propriétés optiques des matériaux semiconducteurs à puits quantiques et applications dans le domaine du traitement du signal », Collection SFO-VOLUME 1, EDP, pages 205-251, THOMSON-CSF, Domaine de Corbeville, F-91404 Orsay, France, 1990.
- [67] L. Becerra, «Hétéro structures et Dispositifs Microélectroniques à Base d'Oxydes High-k Préparés sur Silicium par EJM », Thèse de doctorat, L'Ecole Central de Lyon, France, page 215, 2008.
- [68] M. Kostrzewa, «Vers le développement de nouveaux substrats complaints et paramorphiques pour l'hétéro épitaxie de matériaux désaccordés en maille », Thèse de doctorat, Ecole Central de Lyon, France, 2003
- [69] H. Mathieu, «Physique des semiconducteur et des composants électroniques», 4^{ème} éditions, Masson, Paris 1998.

Références

- [70] A. Mahfoud, « Modélisation des cellules solaires tandem à couche minces et à haut rendement », Thèse Doctorat, département d'électronique, Université Sétif, (2015).
- [71] A. Ricaud, « Photopiles solaires : De la physique de conversion Photovoltaïques aux filieres, Materiaux et Procédés », 1^{ère} édition, Presses polytechniques et universitaires romandes, 500 pages, 1997.
- [72] S.M. Sze, « Physics of semiconducteurs Devises », 2nd Edition, John Wiley & Sons, 2001.
- [73] H. J. Hovel, « Semiconductors and semimetals », Vol. 11. Solar cell, Academic Press New York San Fransisco London, 1975.
- [74] J. P. Connelly, K. W. J. Barnham, J. Nelson, P. Griffin, G. Haarpaintner, « Optimisation High Efficiency $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ MQW Solar Cells », Pro. Solar World Congress, Harare, Zimbabwe, 11 pages, 1995.
- [75] P. Wufel, « Physics of solar cell, from principles to new concept » Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 186 pages, 2005.
- [76] <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/phyopt/antiref.html#c2>
- [77] F. K. Rault, A. Zahedi, « Computational analysis of the refractive index of multiple quantum wells for QWSC application », Microelectronics Journal. 34(2003) 149-158.
- [78] F. K. Rault, A. Zahedi, « Computational modelling of the reflectivity of AlGaAs/GaAs and SiGe/Si quantum well solar cells » Solar Energy Materials & Solar Cells 79 (2003) 471-484.
- [79] F. K. Rault, A. Zahedi, « Ideal quantum well solar cell designs », Physica E 21(2004) 61-70.
- [80] M. Paulescu, D. A. Vangheli, E. Tulcan-Paulescu et al, « Nanostructured Photovoltaic Cells », West University Publishing House, Timisoara, Romania, 2007.
- [81] S. Fara, P. Sterian, L. Fara, M. Iancu, A. Sterian, « New Results in Optical Modelling of Quantum Well Solar Cells », International Journal of Photoenergy, Volume 2012, Article ID 810801, 9 pages.
- [82] I. Suemune, « Réfractive Index in III-V Quantum Wells and Superlattices », Vol. 15, INSPEC Pub. (UK), EMIS, London 1996, pp. 283-287.
- [83] F. K. Rault, A. Zahedi, « Computational modeling of the Refractive Index and Reflectivity of the Quantum Well Solar Cell », Elsevier, Microelectronics Journal 34 (2003), 797-803.

Références

- [84] M. Paulescu, P. Gravila, and E. Tulcan-Paulescu, «Optical and electrical modelling of multiple quantum well solar cells», Scientific Bulletin of the “Politehnica” University of Timisoara, vol. 53, no. 66, pp. 114–121, 2007.
- [85] M. D. Archer, R. Hill, «Clean Electricity From Photovoltaics», illustrated, reprint, Imperial College press, Series on photo conversion of Solar Energie-Vol-1, 844 pages, 2001.
- [86] M. Paulescu and E. Tulcan-Paulescu, «Assessments on the multijunction solar cells photoelectric efficiency related to the semiconductor band gap and outdoor conditions», Modern Physics Letters B, vol. 19, no. 9-10, pp. 447–457, 2005.
- [87] X. Aubert, «Transformation de coordonnées et schémas compacts aux différences finies appliquées à la résolution des équations de Navier-Stokes», Thèse de Doctorat, Faculté des Sciences Appliquées, Université catholique de Louvain, Louvain-la-Neuve, 1983.
- [88] M. J. Crochet, B. Debbaut, R. Kennings, J. M. Marchal, «polyflow :a multi-purpose finite element program for continuous polymer flows, in Computer modelling for extrusion and other continuous processes», O. Brien Ed., Hanser, Munich, pp.25-50, 1992.
- [89] A. P. Gonez, «Méthode directe de résolution d’écoulements turbulents discrétisés par les éléments finis », Thèse de Doctorat, Faculté des Sciences Appliquées, Université catholique de Louvain, Louvain-la-Neuve, 1994.
- [90] M. Rappaz, M. Bellet, M. Deville, «Modélisation numérique en science et génie matériaux », PPUR Presses polytechniques, 551pages, 1998.
- [91] B. Radi, A.E. Hami, «Méthodes numériques avancées sous Matlab ®2 : Résolution des équations non linéaires, différentielles et aux dérivées partielles», volume 7, 236 pages, ISTE Edition Ltd 2018.
- [92] D. Euvrard, «Résolution numérique des équations aux dérivées partielles de la physique, de la mécanique et des sciences de l’ingénieur : différences finies, problèmes en domaine non borné», 3ieme Editions, Masson 1994 (329pages).
- [93] M. L. Khene, «Etude de l’aimantation dans les supraconducteurs », Thèse Doctorat, département de génie électrique, Université de Biskra, 2015.
- [94] J. D. Hoffman, S. Frankel, «Numerical Methods for Engineers and Scientists», 2nd Edition, CRC Press, 838 pages, 2001.
- [95] P. A. Nikriyuk, «Computational thermo-fluid dynamics: in materials science engineering», Weinheim: Wiley-VCH Verlag, 357 pages, 2011.
- [96] J. P. Connolly, «Modelling Multiple Quantum Well Solar Cells», PhD thesis, Imperial college, London 1997.

Références

- [97] K.W.J. Barnham, I. Ballard, J.P. Connolly, N.J. Ekins-Daukes, B.G. Kluftringer, J. Nelson, C. Rohr, «Quantum well solar cells», *Physica E* 14 (2002) 27–36.
- [98] K. W. Barnham, B. Braun, J. Nelson, and M. Paxman, «Short circuit current and energy efficiency enhancement in a low dimensional structure photovoltaic device», *J. Appl. Phys. Lett.* 59, 135(1991).
- [99] K.W.J. Barnham, J.P. Connolly, N. Ekins-Daukes, B. Kluftringer, J. Nelson, C. Rohr, «Recent results on quantum well solar cells», *J. Mater. Sci. Mater. Electron.* 21 (2000) 531–536.
- [100] M. Paxman, J. Nelson, B. Braun, J.P. Connolly, K.W.J. Barnham, C.T. Foxon, J.S. Roberts, «Modeling the spectral response of the quantum well solar cell», *J. Appl. Phys.* 74 (1) (1993) 614–621.
- [101] H.C. Hamaker, «Computer modeling study of the effects of inhomogeneous doping and/or composition in GaAs solar cell devices», *J. Appl. Phys.* 58 (6) (1985) 2344–2351.
- [102] E. H. Li, «Material parameters of InGaAsP and InAlGaAs systems for use in quantum well structures at low and room temperatures», *Physica E* 5 (2000) 215–273.
- [103] ASTM G173-03 Standard Tables for Reference Solar Spectral Irradiances: Direct Normal and Hemispherical on 37 °C Tilted Surface, ASTM International. For referenced ASTM standards, visit the ASTM website {www.astm.org}, or contact ASTM Customer Service at service@astm.org. For Annual Book of ASTM Standards volume information, refer to the standard's Document Summary page on the ASTM website.
- [100] Ian Mark Ballard, «ELECTRICAL AND OPTICAL CHARACTERISATION OF MQW SOLAR CELLS UNDER ELEVATED TEMPERATURES AND ILLUMINATION LEVELS», Thesis Ph.D., University of London, 1999.
- [104] J. Nelson, I. Ballard, K. Barnham, J.P. Connolly, J.S. Roberts, M. Pate, «Effect of quantum well location on single quantum well p–i–n photodiode dark currents», *J. Appl. Phys.* 86 (10) (1999) 5898–5905.
- [105] R.K. Ahrenkiel, «Minority-carrier lifetime and diffusion length in AlGaAs», (1992), in: S. Adachi (Ed.), *Properties of Aluminium Gallium Arsenide*, INSPEC, London, 1993, pp. 221–224.
- [106] J. Nelson, «Quantum well solar cells, in: M.D. Archer, R. Hill (Eds.), *Clean Electricity from Photovoltaics*», Imperial College Press, London, 2001, (Chapter 10).

Références

- [107] D.E. Aspnes, S.M. Kelso, R.A. Logan, R. Bhat, «Optical properties of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ », *J. Appl. Phys.* 60 (2) (1986) 754–767.
- [108] J.C. Rimada, L. Hernández, J.P. Connolly, K.W.J. Barnham, «Conversion efficiency enhancement of AlGaAs quantum well solar cells», *Microelectronics Journal* 38 (2007) 513–518.
- [109] G. Haarpaitne, «Electrical characteristics of quantum well solar cells», Ph. D, Physics Department, Imperial College London, July 1995.
- [110] J. P. Pocholle, M. Razeghi, J. Raffy, M. Papuchon, C. Weisbuch, C. Puech, A. Vandendorre, J. L. Bezy, L. Heinrich, J. E. Vimont, «Observation d'états excitoniques à température ambiante dans les semiconducteurs à puits quantiques de type InGaAs/InP (Applications) », *Revue phys. App.* 22 (1987) 1239-1251.
- [111] A. McEvoy, T. Markvart, L. Castaner, «Practical Handbook of Photovoltaics», 2nd Edition, Elsevier Ltd, Academic Press 1268 pages, 2011.

Publications

- 1) SAMIRA LAZNEK, AFEK MEFTAH, AMJAD MEFTAH, NOUREDINE SENGOUGA, “Numerical Simulation of AlGaAs/GaAs p-i-n quantum well solar cell”. N 26(2018) : Courrier du Savoir-biskra.dz.
- 2) Samira Laznek, Afak Meftah, Amjad Meftah, Nouredine Sengouga, “Semi-Analytical Simulation and Optimization of AlGaAs/GaAs p-i-n quantum well solar cell”, Applied Solar Energy, Volume 54, Issue 4, pp 261-269.

