



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>



THÈSE

en vue de l'obtention du titre de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE LORRAINE

École Doctorale Énergie Mécanique Matériaux (EMMA) - ED 409

Spécialité : Physique

présenté par :

Abdoulwahab ADAINE

préparée au sein du :

Laboratoire Matériaux, Optiques, Photonique et Systèmes - EA 4423

Université de Lorraine et CentraleSupélec

**Optimisation numérique de cellules solaires à très haut rendement
à base d'InGaN**

Soutenue publiquement le 06 juillet 2018, devant les membres du jury :

Thierry Taliercio	Professeur des Universités, Université Montpellier-II	Rapporteur
Nicolas Cavassilas	Maître de Conférences, HDR, Université d'Aix-Marseille	Rapporteur
Brigitte Vigolo-Greffier	Chargée de Recherche CNRS, HDR, Institut Jean Lamour	Examinatrice
Sidi Ould Saad Hamady	Maître de Conférences, HDR, Université de Lorraine	Co-directeur
Nicolas Fressengeas	Professeur des Universités, Université de Lorraine	Directeur
Mustapha Lemiti	Professeur des Universités, INSA-Lyon	Président

Remerciements

Ce travail de thèse a été mené au sein de l'équipe « Matériaux » au Laboratoire Matériaux Optiques, Photonique et Systèmes (LMOPS) de l'université de Lorraine et de CentraleSupélec.

Je voudrais commencer par remercier tout particulièrement mes directeurs de thèse Nicolas Fressengeas et Sidi Ould Saad Hamady, de m'avoir permis d'effectuer cette thèse. Je les remercie pour leur disponibilité tout au long de ce travail, pour leurs conseils et suggestions avisés sans lesquels ce travail n'aurait pas abouti, ainsi que pour tous leurs efforts pour que ce travail se fasse dans les meilleures conditions. Je veux qu'ils trouvent ici l'expression de toute ma gratitude.

J'adresse de sincères remerciements à M. Nicolas Cavassilas et M. Thierry Taliercio d'avoir accepté de relire ce travail de thèse et d'en être rapporteurs. Je tiens à remercier M. Mustapha Lemiti de m'avoir fait l'honneur d'être le président du jury. Mes remerciements vont également à Mme Brigitte Vigolo-Greffier d'avoir accepté de faire partie de ce jury comme examinatrice. Ce manuscrit a bénéficié de leurs remarques et commentaires précieux qui m'ont permis d'améliorer sa compréhension.

Je voudrais également adresser mes sincères remerciements à tous les permanents de LMOPS que j'ai eu le plaisir de côtoyer tous les jours.

Je tiens à remercier tous les doctorants post-doctorants, et stagiaires du laboratoire, à Hassan, Sarah, Imed, Elise, Alban, Joris, Marie, Sheryfa, Ines, Rawdha, Ivan, Stéphane, Jean, Thibaut et aux autres, merci pour tout les moments inoubliables qu'on a passé ensemble.

Je remercie ensuite l'école doctorale EMMA, pour son accompagnement, plus particulièrement à M. Dominique Daloz et Mme Christine Sartori, pour leur professionnalisme, leur disponibilité et leur gentillesse. Merci également pour l'organisation des doctoriales 2016. C'était une expérience inoubliable, riche d'enseignements et en belles rencontres.

Pour finir, je tiens à remercier toute ma famille et mes amis qui n'ont eu de cesse de demander « alors quand est-ce que tu soutiens ». Un merci tout particulier à ma mère, qui m'a soutenue pendant toutes mes années d'études et ma compagne, Hadjara Saindou, qui me gratifie tous les jours de son amour.

Table des matières

Contexte et objectifs de la thèse	1
I Cellules photovoltaïques InGaN à haut rendement	5
I.1 Cellules solaires photovoltaïques	6
I.1.1 Le principe de fonctionnement d'une cellule solaire	6
I.1.1.1 L'effet photovoltaïque	6
I.1.1.2 Les paramètres de la cellule solaire	8
I.1.1.3 Le rayonnement solaire	11
I.1.1.4 De la cellule au module	12
I.1.2 Les filières photovoltaïques	12
I.1.2.1 Les filières à base de silicium cristallin	12
I.1.2.2 Les couches minces	15
I.2 Le Nitrure de Gallium Indium (InGaN)	19
I.2.1 Les propriétés structurales	19
I.2.1.1 La structure cristallographique	19
I.2.1.2 La polarisation	20
I.2.1.3 Les propriétés optiques du matériau	24
I.2.2 Les propriétés électriques	25
I.2.2.1 L'expression du gap de l' $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$	25
I.2.2.2 Les phénomènes de recombinaison	26
I.2.3 L'élaboration d'InGaN	28
I.2.3.1 Le substrat pour l'hétéroépitaxie	28
I.2.3.2 L'épaisseur critique	29
I.2.3.3 Défauts structuraux	30
I.2.3.4 Le dopage résiduel dans les nitrures	32
I.2.3.5 Le dopage	32

I.2.4	Cellules solaires à base d'InGaN	33
I.2.4.1	Cellules solaires à simple jonction	33
I.2.4.2	Cellules solaires à multijonction	37
I.2.4.3	Objectifs de la thèse	40
II	Modélisation et optimisation	43
II.1	Modélisation et simulation numérique	44
II.1.1	Modèle dérive-diffusion	44
II.1.1.1	L'équation de poisson	46
II.1.1.2	Les équations de continuité	46
II.1.1.3	Les équations de transport	47
II.1.2	Les modélisations physiques	48
II.1.2.1	Les modèles physiques utilisés	49
II.1.2.2	Les propriétés électriques d'InGaN	52
II.2	La méthodologie d'optimisation	55
II.2.1	Les différentes méthodes d'optimisation	55
II.2.1.1	L'optimisation paramétrique	56
II.2.1.2	La méthode de la force brute	57
II.2.2	Notre approche : l'optimisation multivariée	58
II.2.2.1	Les méthodes mathématiques d'optimisation	58
II.2.2.2	Le choix des méthodes	63
II.3	La mise en œuvre	68
II.3.1	L'outil de simulation Atlas TM (SILVACO TM)	68
II.3.1.1	Le mode de fonctionnement	69
II.3.1.2	L'ordre de commandes d'Atlas	70
II.3.2	Le programme d'optimisation	71
III	Conception de nouvelles structures photovoltaïques à base d'InGaN	77
III.1	Cellule solaire sans couche P	78
III.1.1	Le contact métal/semi-conducteur	78
III.1.1.1	Le travail de sortie d'un matériau	78
III.1.1.2	La cellule solaire Schottky	80
III.1.2	Simulation et optimisation d'une cellule solaire Schottky	82
III.1.2.1	Les performances de la cellule	82

III.1.2.2	L'impact des paramètres sur le rendement	85
III.1.3	Nouvelle structure MIN	89
III.1.3.1	Performances de la cellule	89
III.1.3.2	Fiabilité des performances	93
III.2	Les cellules solaires conventionnelles	95
III.2.1	L'optimisation des structures PN et PIN	96
III.2.1.1	La structure PN	96
III.2.1.2	La structure PIN	97
III.2.2	Comparaisons des performances	98
III.2.2.1	Comparaison entre la structure PN et PIN	98
III.2.2.2	Comparaison des structures Schottky avec les structures PN/PIN	99
III.3	Réalisation technologique	100
III.3.1	Limites des performances des cellules InGaN	100
III.3.1.1	Limites en teneur d'indium	100
III.3.1.2	Impact des défauts structuraux	102
III.3.2	L'impact de la couche P	104
III.3.2.1	Variation du dopage P	104
III.3.2.2	Évolution des caractéristiques courant-tension	105
IV	Modélisation et optimisation de structures complexes	109
IV.1	Cellules photovoltaïques à multijonction	110
IV.1.1	Modélisation d'une multijonction	110
IV.1.1.1	Architecture de la cellule multijonction	110
IV.1.1.2	Mécanisme de transport de charges	112
IV.1.2	Performances des cellules solaires multijonctions	113
IV.2	Optimisation d'une double-jonction	116
IV.2.1	Description de la structure	116
IV.2.2	Les performances de la cellule solaire	119
IV.2.3	Comparaison du résultat à la littérature	122
IV.3	Contraintes technologiques	122
IV.3.1	Phénomènes de polarisation	122
IV.3.1.1	Polarisation spontanée	123
IV.3.1.2	Polarisation totale	125

IV.3.2 Défauts structuraux	127
IV.3.2.1 Modélisation des défauts structuraux	128
IV.3.2.2 Influence des défauts structuraux	129
IV.3.3 Qualité des interfaces	133
IV.3.3.1 Défauts d'interface InGaN/GaN	133
IV.3.3.2 Influence de la résistance des contacts	133
Conclusion	137
Bibliographie	141

Contexte et objectifs de la thèse

La nécessité de promouvoir un accès universel à une énergie durable fait du domaine de l'énergie un axe de développement majeur autour duquel de nombreuses recherches se concentrent. L'objectif ultime de toutes ces recherches est le développement d'un futur mix énergétique bas-carbone. Actuellement, la consommation mondiale d'énergie est très majoritairement satisfaite par les combustibles fossiles (pétrole, charbon, gaz naturel) polluants en carbone. Ces derniers assurent près de 85% de la consommation mondiale en énergie. Les énergies renouvelables (éolien, photovoltaïque) assurent, quant à eux, environ 3% de la consommation mondiale [1]. Afin de parvenir à une énergie décarbonée, la part des énergies renouvelables dans le mix énergétique devrait considérablement augmenter. D'énormes efforts sont donc actuellement entrepris à l'échelle mondiale pour le développement de ces énergies renouvelables dites également "propres".

Dans le secteur du photovoltaïque, les attentes sont nombreuses : augmentation de l'efficacité de conversion, diminution des coûts de production, diminution de l'impact environnemental, etc. Actuellement, la filière est largement dominée par la technologie silicium cristallin avec près de 93% de la production mondiale en 2016 [2]. Cependant, la production des cellules solaires à base de silicium reste coûteuse et nécessite une importante quantité de matériau. En outre, les cellules en silicium présentent actuellement en laboratoire, un rendement maximal de 25,6% [3], ce qui est très proche de la limite théorique maximale pour une cellule simple jonction [4]. Par conséquent, le besoin grandissant d'énergie photovoltaïque a poussé les travaux de recherche sur l'utilisation d'autres matériaux alternatifs, bien que cela ne signifie nullement l'arrêt des recherches dans la filière silicium. Aujourd'hui, ces recherches, très nombreuses et variées, se focalisent principalement sur les technologies à couches minces. Parmi ces technologies, on trouve notamment, celle à base de matériaux III-V¹, très prometteuse en termes d'efficacité. Elle

1. Matériaux composés d'éléments de la colonne III et de la colonne V du tableau périodique des éléments.

détient, de nos jours, les records en rendements avec des cellules solaires à multijonctions [3]. Dans ce travail de thèse, nous nous intéressons à l'alliage de Nitrure de Gallium-Indium (InGaN).

L'alliage InGaN est devenu au cours des dernières années un matériau prometteur pour les applications optoélectroniques, notamment photovoltaïques. En effet, ce matériau possède de nombreux avantages, à savoir, une bande d'énergie interdite directe qui peut couvrir une grande partie du spectre solaire en modifiant le taux d'indium, un coefficient d'absorption élevé et une très bonne tolérance aux radiations. Du fait de sa large couverture spectrale, l'InGaN est surtout étudié (dans le domaine photovoltaïque) dans la perspective de réaliser des cellules photovoltaïques multijonction à très haut rendement. En effet, il est possible d'avoir, avec le seul matériau InGaN, plusieurs couches ayant différentes bandes d'énergie interdites, cela en changeant seulement la composition d'indium. De ce fait, nous avons la possibilité de concevoir plus aisément les cellules solaires à multijonction². Cependant, malgré ces nombreux avantages, les enjeux technologiques tels que le manque de substrat adapté pour la croissance épitaxiale, la difficulté de réaliser le dopage de type P, ou encore, une incorporation d'indium relativement faible, sont autant de facteurs qui font obstacle au développement de la filière InGaN.

Ce travail de thèse propose de conduire une investigation approfondie sur les performances de différentes structures de cellules solaires à base d'InGaN. Il s'inscrit dans le cadre d'un projet visant à l'optimisation et à l'étude de cellules solaires en couches minces. Cette approche repose sur une démarche rigoureuse de simulation s'appuyant autant que possible sur des modèles et résultats empiriques. Le programme de simulation utilise le logiciel ATLAS de SILVACO et le programme d'optimisation est basé sur la librairie libre d'optimisation SciPy. Il s'agit d'une nouvelle approche utilisant l'optimisation mathématique multivariée qui permet d'évaluer les performances des cellules solaires en optimisant simultanément plusieurs paramètres (physiques et géométriques) de la cellule solaire.

2. Cellule constituée d'un empilement de plusieurs cellules absorbant chacune une partie spécifique du spectre solaire.

Le manuscrit se décompose en quatre parties, comme suit :

Le premier chapitre aborde dans un premier temps le principe de fonctionnement physique d'une cellule solaire, ses paramètres importants et les différentes filières photovoltaïques existantes. Les propriétés d'InGaN et ses caractéristiques sont abordées dans un deuxième temps ainsi que l'état de l'art de la filière photovoltaïque InGaN.

Le deuxième chapitre présente les modèles physiques utilisés pour la modélisation des structures de cellules solaires et la nouvelle approche utilisée pour les optimiser. la mise en œuvre de ces méthodes est ensuite abordée sous l'angle technique.

Le troisième chapitre est consacré à l'étude des structures de cellules solaires mono-jonction. Nous présentons l'optimisation de nouvelles structures de cellule et les comparons avec les structures conventionnelles. Une étude réalisée en tenant compte des contraintes technologiques actuelles est présentée dans la dernière partie du chapitre.

Le quatrième chapitre, quant à lui, est dédié à l'étude d'une structure double-jonction à base d'InGaN. Une première partie présente l'architecture des dispositifs à multijonction. Les performances de la cellule sont ensuite présentées en deuxième partie. Enfin, dans la dernière partie, sont abordés les effets de différents facteurs susceptibles de réduire les performances de la cellule.

Enfin, ce travail fait l'objet de différentes publications et de communications dans des conférences nationales et internationales dont la liste est donnée à la fin du manuscrit.

I

Cellules photovoltaïques InGaN à haut rendement

Sommaire

I.1	Cellules solaires photovoltaïques	6
I.1.1	Le principe de fonctionnement d'une cellule solaire	6
I.1.2	Les filières photovoltaïques	12
I.2	Le Nitrure de Gallium Indium (InGaN)	19
I.2.1	Les propriétés structurales	19
I.2.2	Les propriétés électriques	25
I.2.3	L'élaboration d'InGaN	28
I.2.4	Cellules solaires à base d'InGaN	33

I.1 Cellules solaires photovoltaïques

L'épuisement des ressources naturelles et les impératifs de protection de l'environnement ont amorcé un processus dynamique de transition énergétique dans le monde. Il consiste à passer du système énergétique actuel, dépendant fortement des énergies fossiles à un système reposant principalement sur des sources renouvelables. On distingue parmi ces dernières l'énergie solaire photovoltaïque qui connaît un fort développement ces dernières années. La filière photovoltaïque offre une solution très pratique pour l'obtention de l'électricité partout, aussi bien dans de grands parcs solaires que sur des petites installations autonomes isolées. Elle s'est d'abord principalement développée grâce à l'industrie spatiale avant d'être largement démocratisée pour s'installer sur nos toits et devenir l'une des énergies alternatives de demain.

Le présent chapitre est une introduction qui permet dans un premier temps de présenter le cadre physique de ce travail de thèse dédié à l'interaction entre le rayonnement lumineux et un matériau semi-conducteur. Nous n'allons pas entrer dans les détails de la physique des semi-conducteurs car de nombreux auteurs illustres l'ont déjà entrepris avec succès [5]. Nous allons juste dans la première partie et de façon succincte et brève, décrire l'effet photovoltaïque et les paramètres d'une cellule solaire. La seconde partie dresse un état des lieux et les perspectives de la filière photovoltaïque. Enfin, en dernière partie, nous décrirons le matériau au centre de cette thèse, le Nitrure de Gallium et d'Indium (InGaN) et analyserons l'état de l'art des cellules solaires à base de ce matériau.

I.1.1 Le principe de fonctionnement d'une cellule solaire

I.1.1.1 L'effet photovoltaïque

L'énergie photovoltaïque est obtenue en exposant à la lumière un capteur appelé cellule solaire ou photopile. Il s'agit d'un phénomène physique dit "effet photovoltaïque". La découverte de ce dernier est attribuée à Antoine Becquerel en 1839 [6]. Le principe repose sur l'interaction lumière-matière dans les semi-conducteurs. En effet, lorsqu'un matériau semi-conducteur est exposé à la lumière, les photons d'énergie égale ou supérieure à la largeur de la bande interdite sont absorbés créant ainsi des paires électron-trou par le passage des électrons de la bande de valence vers la bande de conduction. Si ces paires électron-trou ne sont pas séparées, leur recombinaison se fait très rapidement en libérant

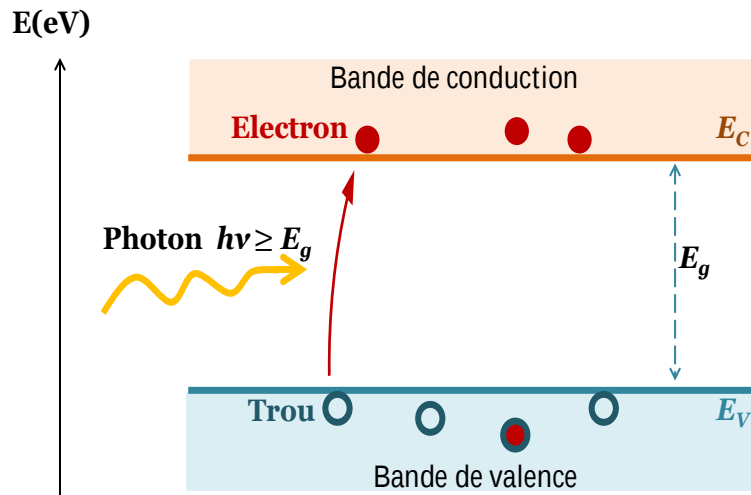


FIGURE I.1 – Génération de paire électron-trou. E_C est l'énergie du bas de la bande de conduction et E_V , l'énergie du haut de la bande de valence

un phonon, selon l'énergie absorbée, et un photon.

Le rôle principal d'une cellule photovoltaïque est de réduire ces recombinaisons et donc de forcer les électrons et les trous à se diriger chacun vers une face opposée du matériau. Ainsi, il apparaîtra une différence de potentiel, donnant lieu à un photocourant. L'une des solutions couramment utilisées, pour extraire sélectivement les électrons et les trous est de créer un champ électrique permanent dans le matériau au moyen d'une jonction entre une couche de semi-conducteur dopée P¹ et une autre couche dopée N² (jonction PN) (voir figure I.2).

La mise en contact d'un semi-conducteur dopé P et d'un semi-conducteur dopé N fait apparaître un phénomène de diffusion dans la jonction. Les électrons majoritaires dans la couche N diffusent vers le côté P et les trous majoritaires dans la couche P diffusent vers le côté N. A la jonction, les porteurs de charge (électrons et trous) se recombinent créant une zone dépourvue de porteurs mobiles, appelée zone de charge d'espace (ZCE). Il apparaît alors une différence de potentiel et donc un champ électrique orienté de la région N vers P. Lorsqu'on éclaire la jonction, les photons d'énergie ($h\nu$) égale ou supérieure à l'énergie de la bande d'énergie interdite (E_g) du matériau sont absorbés. Des paires électron-trou sont ensuite créées par le passage des électrons de la bande de valence à la bande de conduction. Le champ électrique interne créé dans la ZCE va séparer spatialement les porteurs photogénérés : les électrons sont dirigés vers la couche N et les trous vers la couche P

1. Une couche dopée P est une couche possédant un excès de trous.

2. Une couche dopée N est une couche possédant un excès d'électrons.

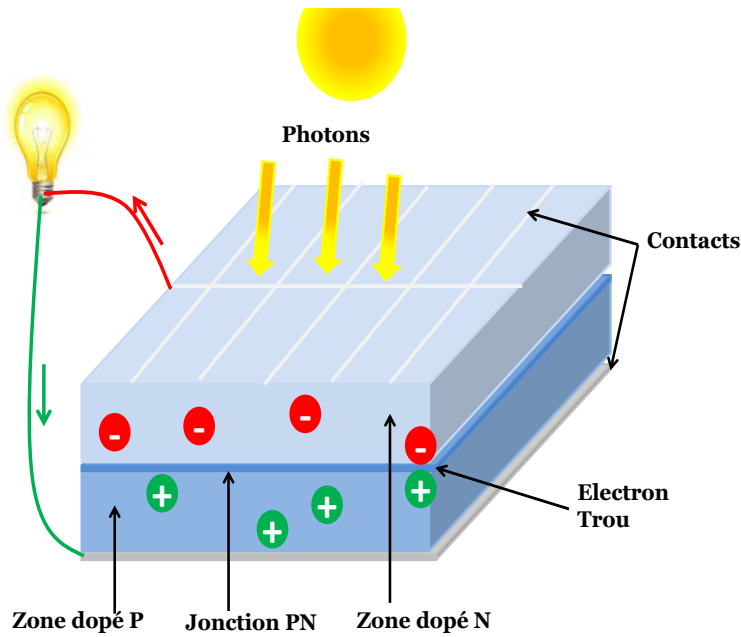
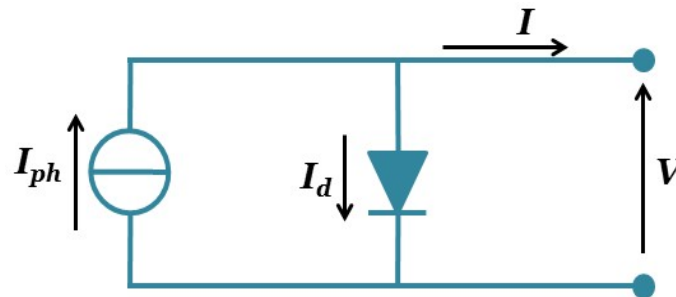


FIGURE I.2 – Principe de l'effet photovoltaïque

FIGURE I.3 – Schéma électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque idéale. I est le courant total produit par la cellule. I_{ph} est le courant photogénéré proportionnel à l'intensité de l'éclairement. I_d est le courant traversant la diode. V est la tension délivrée par la cellule.

créant ainsi un courant électrique continu entre les électrodes métalliques déposés de part et d'autre de la structure (voir Figure I.2).

I.1.1.2 Les paramètres de la cellule solaire

Une cellule solaire exposée aux rayonnements solaires, peut être modélisée par le circuit de la figure I.3.

Dans les faits, il existe plusieurs facteurs de perte de la conversion photovoltaïque au sein d'une cellule solaire. Ces pertes sont généralement dues à la nature du matériau et à la technologie utilisée pour la réalisation de la cellule. On peut entre autres citer les pertes par effet Joule dues à la résistivité des différents contacts et celles des couches. Cette résistivité est modélisée par une résistance série (R_s). Cette dernière doit être idéalement la

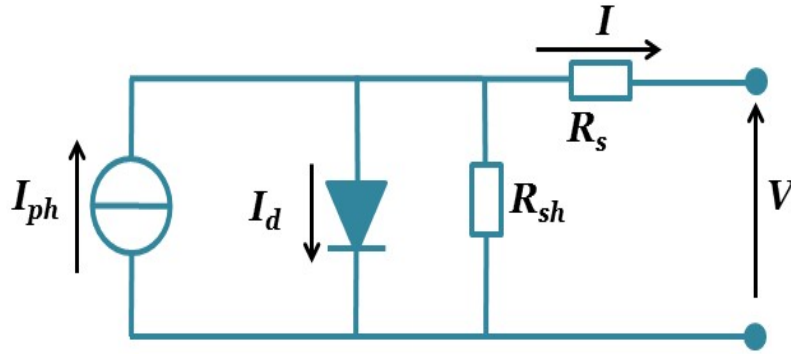


FIGURE I.4 – Schéma électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque. R_s est la résistance série du circuit. R_{sh} est la résistance parallèle du circuit (shunt).

plus faible possible afin de limiter son influence sur les performances de la cellule solaire (dans le cas idéal, $R_s = 0$). La présence de tout courant de fuite causé par les recombinaisons et les défauts dans la structure est traduite par une résistance parallèle ou shunt (R_{sh}). Celle-ci doit être idéalement la plus élevée possible (dans le cas idéal, $R_{sh} = \infty$). Enfin les recombinaisons des porteurs dans la zone de charges d'espace sont traduites par un coefficient d'idéalité³ (n) supérieur à l'unité. En tenant compte de tous ces paramètres, on obtient alors le circuit électrique de la figure I.4.

D'autres facteurs peuvent également engendrer des pertes non négligeables du rendement de conversion d'une cellule photovoltaïque. Citons par exemple :

- L'absorption partielle des photons incidents : les photons incidents d'énergie inférieure au gap du semi-conducteur ($h\nu < E_g$) ne peuvent générer de paires électron-trou et sont donc perdus.
- Les pertes par thermalisation : un photon incident d'énergie supérieure au gap ($h\nu > E_g$) ne génère qu'une seule paire électron-trou ; l'excès d'énergie est transféré sous forme de chaleur dans le matériau.
- Les pertes dues à la réflexion des rayonnements lumineux incidents à la surface : seule une partie du rayonnement solaire est absorbée, l'autre partie étant réfléchie.
- Les pertes dues à la couverture partielle de la surface de la cellule par les contacts métalliques de la face avant.

D'après la figure I.4, Le courant I issu de la cellule peut être exprimé en fonction de la tension appliquée V , de manière générale, avec l'expression suivante [7] :

3. Facteur empirique qui est égale à 1, pour une jonction idéale et prend une valeur comprise entre 1 et 2, lorsqu'on tient compte des courants de recombinaison dans la jonction.

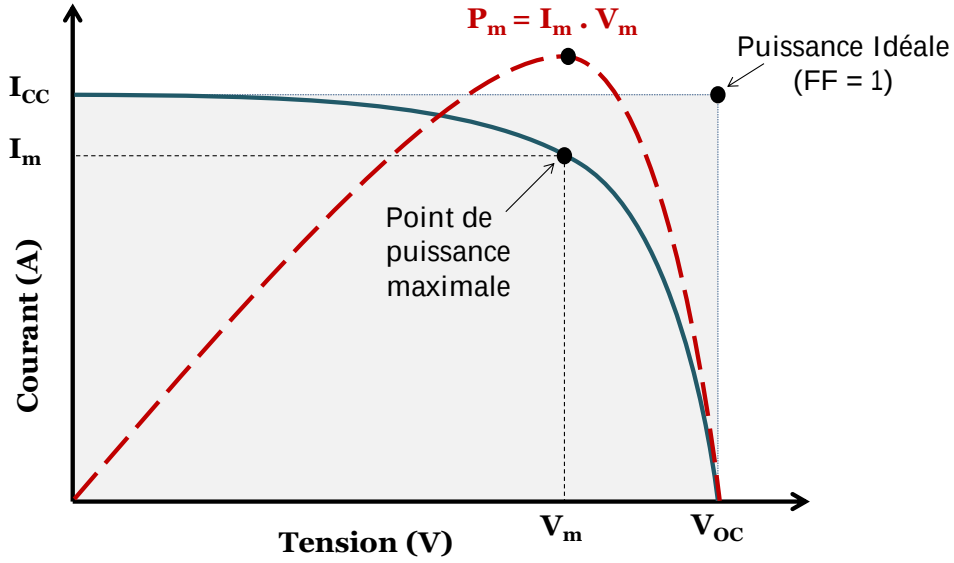


FIGURE I.5 – Caractéristiques courant-tension $I(V)$ (en trait plein) et puissance (en trait discontinu) d'une cellule solaire.

$$I(V) = I_{ph} - I_0 \times \exp\left(\frac{q(V + R_s I)}{nK_B T}\right) - \frac{(V + R_s I)}{R_{sh}}, \quad (I.1)$$

où I_0 est le courant de saturation, n est le coefficient d'idéalité de la diode, K_B est la constante de Boltzmann, T représente la température de la cellule et q est la charge électronique élémentaire.

Les grandeurs physiques importantes de la cellule solaire découlent de sa caractéristique courant-tension, $I(V)$, représentée sur la figure I.5).

- La tension de circuit-ouvert, notée V_{CO} , tension maximale aux bornes de la cellule à courant nul ($I = 0$), elle dépend essentiellement de la température de la cellule et du spectre de l'éclairement.
- Le courant de court-circuit, noté I_{CC} , est le courant circulant dans la cellule à tension nulle ($V = 0$); il dépend principalement de l'intensité de la lumière et de la surface de la cellule.
- Le facteur de remplissage (facteur de forme), noté FF , désigne le rapport entre puissance maximale fournie (P_m) sur le produit $I_{CC} V_{CO}$. Il est toujours inférieur à 1.
- Le point de puissance maximale, P_m , obtenu pour un courant et une tension optimaux (I_m, V_m).

Le rendement de conversion (η) de la cellule est défini par le rapport entre la puis-

sance maximale (P_m) et la puissance du rayonnement solaire incident (P_{in}) sur la cellule photovoltaïque [7] :

$$\eta = \frac{P_m}{P_{in}} = \frac{FF \cdot I_{CC} \cdot V_{CO}}{P_{in}} \quad (I.2)$$

Avec

$$V_{CO} = \frac{nK_B T}{q} \times \ln \left(\frac{I_{Ph}}{I_0} + 1 \right) \quad (I.3)$$

I.1.1.3 Le rayonnement solaire

L'énergie solaire exploitée ici par les cellules solaires présente un spectre d'émission comparable à celui d'un corps noir à 5800K. Hors de l'atmosphère, le rayonnement solaire a une puissance moyenne de $1,37\text{kW/m}^2$. Cependant, en traversant l'atmosphère, une partie de cette énergie est absorbée par diverses molécules dans l'atmosphère telles que l'oxygène, l'ozone ou encore le dioxyde de carbone. Au niveau de la surface terrestre, le rayonnement solaire a une puissance maximale d'environ 1kW/m^2 . Le spectre solaire obtenu à la surface de la terre est donc fonction de la composition de l'atmosphère et surtout de l'épaisseur d'atmosphère traversée par le rayonnement.

Afin de caractériser les différents spectres solaires incidents, on a défini le paramètre AM (Air Mass) caractérisant la couche atmosphérique parcourue par le rayonnement. En dehors de l'atmosphère, on a le spectre AM0, utilisé pour les applications spatiales. Au niveau de l'équateur, le rayonnement traverse une épaisseur d'atmosphère, on a le spectre AM1. Lorsque le rayonnement fait un angle de 60° par rapport à l'équateur, on a le spectre AM2. On définit le spectre AM1.5 pour un rayonnement faisant un angle de $41,8^\circ$ par rapport à l'équateur correspondant à un rayonnement traversant 1,5 fois l'épaisseur de la couche atmosphérique [8]. Dans ces conditions, l'intensité du rayonnement est normalement inférieure à 1000W/m^2 (environ 827W/m^2), un facteur de normalisation est donc appliqué afin de faire passer l'intensité du spectre à 1000W/m^2 . Le spectre AM1.5 sert aujourd'hui de norme pour les tests standardisés des cellules solaires. C'est ce que nous utilisons donc dans ce travail de thèse.

I.1.1.4 De la cellule au module

Une seule cellule photovoltaïque (PV) constituerait un générateur électrique de très faible puissance pour, par exemple une application domestique. Afin d'augmenter la tension et/ou le courant, un grand nombre de cellules sont connectées en série et/ou en parallèle, encapsulées entre deux feuilles de résine et recouvertes d'un verre et d'un film étanche, pour former les modules photovoltaïques. Ces modules, ou panneaux solaires, sont ensuite assemblés pour constituer des systèmes photovoltaïques, qu'il s'agisse de grandes fermes solaires ou de petites installations.

Dans un montage en série, les cellules sont traversées par le même courant. La tension totale du module correspond à la somme des tensions délivrées par chacune des cellules. Dans un montage en parallèle, le courant total correspond à la somme des courants générés par chacune des cellules. La tension reste la même pour toutes les cellules.

La caractéristique courant-tension d'un panneau solaire est semblable à la courbe courant-tension d'une cellule de base. Par conséquent, tout ce qui est valable pour une cellule solaire reste aussi valable pour un panneau solaire. On prendra juste le soin de ne connecter en série que des cellules identiques ayant la même densité de courant et de ne connecter en parallèle que des cellules ayant la même tension. En effet, un branchement de cellules non identiques peut gravement détériorer les performances de l'ensemble.

I.1.2 Les filières photovoltaïques

Différentes technologies sont aujourd'hui utilisées dans la filière photovoltaïque. La figure I.6 extraite de [2] présente les évolutions des rendements des différentes filières. Nous pouvons observer qu'à ce jour, les plus hauts rendements sont obtenus avec les cellules III-V multijonction sous concentration, tandis que les plus faibles rendements sont obtenus avec les cellules solaires organiques.

I.1.2.1 Les filières à base de silicium cristallin

Le silicium est actuellement, et de loin, le matériau le plus utilisé pour la fabrication des cellules solaires. Près de 93 % de la production mondiale des panneaux solaires est à base de silicium. Le silicium présente principalement deux avantages :

- Son abondance. Il est le deuxième élément le plus abondant sur notre planète après

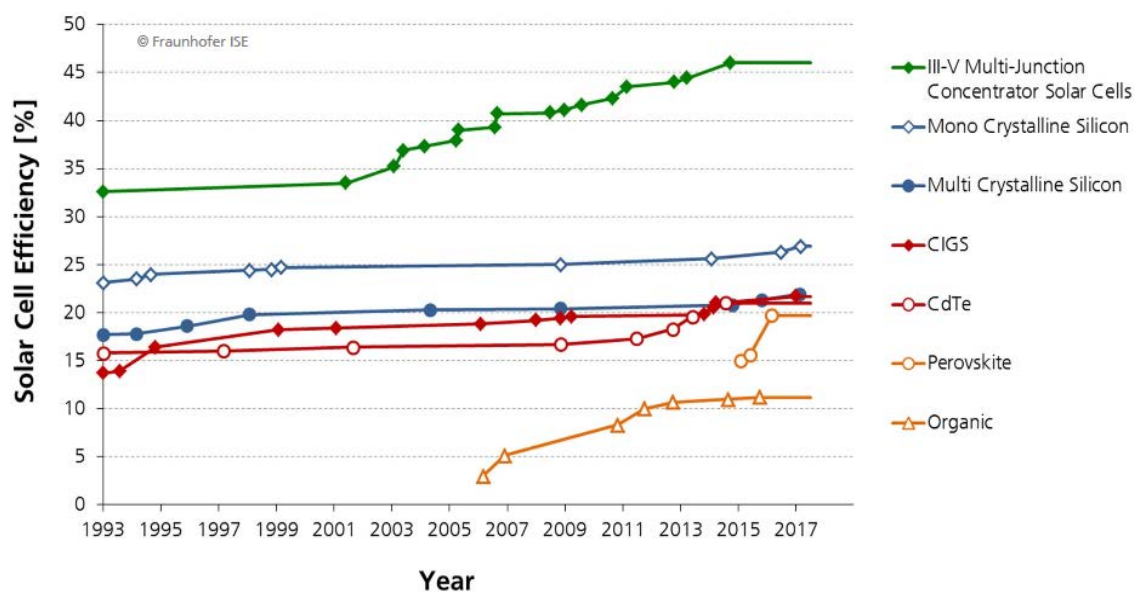


FIGURE I.6 – Évolution en laboratoire du rendement des cellules photovoltaïques [2].

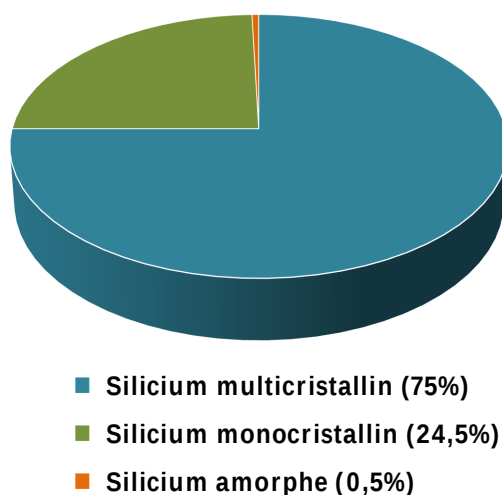


FIGURE I.7 – Production photovoltaïque mondiale, pour la technologie silicium (2015) [2].

l'oxygène, autant dire qu'il est quasiment inépuisable.

- Technologie mature. Les technologies mises en œuvre sont en effet, depuis plusieurs dizaines d'années déjà, bien maîtrisées.

La répartition des différentes technologies de cellules solaires photovoltaïques à base de silicium est représentée sur la Figure I.7. On distingue donc trois familles dans la filière silicium : les cellules monocristallines, les cellules multicristallines, et les cellules amorphes.

a) Les cellules au silicium monocristallin

Le silicium monocristallin (mono-Si), est un matériau composé d'un seul cristal parfaitement homogène. Les cellules solaires issues de ce silicium ont une couleur caractéristique qui est généralement gris-noir métallique.

Les avantages de cette technologie sont : une production des panneaux solaires presque optimale. Les cellules monocristallines offrent les meilleurs rendements (16 à 25 %)[3]. Les panneaux solaires à base de silicium monocristallin présentent une bonne durée de vie (30 ans [9]).

Les inconvénients sont : un coût de production élevé, les panneaux sont donc chers à la vente, un rendement plus faible sous un faible éclairement et une baisse du rendement quand la température augmente ; par conséquent une production faible dans les régions chaudes.

b) Les cellules au silicium multicristallin

Contrairement au silicium monocristallin, le silicium multicristallin (mc-Si) est composé de plusieurs domaines cristallines de tailles variées et orientés de manière aléatoire dans le matériau. Les cellules solaires multicristallines ont donc un aspect non uniforme et sont de couleur bleue.

Cette technologie a comme avantages : un coût de production moins élevé que pour les cellules monocristallines. Les panneaux ont également une bonne durée de vie. Le rendement est correct, même par temps nuageux.

Son principal inconvénient est justement son rendement de conversion qui est légèrement inférieur à celui des cellules au mono-Si. Il est compris entre 14 et 21% [3].

c) Les cellules au silicium amorphe

Les cellules solaires au silicium amorphe (a-Si) sont obtenues à partir d'un dépôt de silicium. Ce dernier peut être déposé sur différents substrats comme du plastique, du verre ou encore sur du métal. Les cellules solaires présentent une couleur grise.

Elles ont comme avantage un procédé de fabrication moins coûteux car il est réalisé à basse température et utilise moins de matériau que le silicium cristallin. En effet le a-Si possède un coefficient d'absorption beaucoup plus élevé que le silicium cristallin. C'est ce qui permet d'avoir des cellules avec des couches de l'ordre du micron d'épaisseur et qui

permet de réduire significativement les coûts de production [10]. C'est une technologie très utilisée pour alimenter des petits objets du quotidien comme des calculatrices ou des montres solaires. Elles ont aussi l'avantage de fonctionner à faible luminosité et peuvent donc produire du courant même à l'intérieur d'une habitation

Elles présentent comme inconvénient un rendement de conversion faible (environ 13%) par rapport aux autres technologies et une faible durée de vie des panneaux solaires.

I.1.2.2 Les couches minces

Comme son nom l'indique, cette filière se base sur l'utilisation des couches minces dont les épaisseurs sont de l'ordre de quelques centaines de nanomètres à quelques micromètres. Cela est permis par une absorption bien plus importante dans ces matériaux si on les compare au silicium. Cette diminution des épaisseurs présente plusieurs avantages. Elle permet, tout d'abord, de réduire considérablement la quantité de matières premières utilisées, et aussi d'ouvrir de nouvelles applications. On peut classer cette filière en trois catégories : les couches minces inorganiques, les couches minces organiques et les couches minces à base de matériaux III-V.

a) Les couches minces inorganiques

Les principaux matériaux utilisés pour cette catégorie de couches minces sont : le tellure de cadmium (CdTe), le CIGS (Cuivre Indium Gallium Sélénium) et le silicium amorphe (a-Si). Ces cellules en couches minces représentaient, en 2016, environ 5% de la production photovoltaïque [2].

Les cellules à base de CdTe sont en plein développement et elles occupent, depuis 2009, une part importante du marché des cellules en couches minces avec des rendements qui atteignent les 21% pour une cellule et 18,6% pour un module photovoltaïque [3]. Les inconvénients majeurs de cette technologie sont la toxicité du cadmium et la rareté du tellure.

Les cellules à base de CIGS sont généralement sous forme d'une hétéro-jonction de type CIGS(p)/CdS(n)/ZnO(n) dans les dispositifs à plus haut rendement. Les rendements records obtenus avec cette technologie sont de l'ordre de 21% pour une cellule, 17,5% pour un module et environ 13,5% pour les modules industriels [3].

Les cellules à base de a-Si ont comme avantages de fonctionner avec un éclaircissement

faible, comme à l'intérieur d'une maison mais affichent un rendement assez faible par rapport aux autres. Les rendements records obtenus sont : 13,6% pour une cellule et 10,5% pour un module [3].

L'un des principaux avantages de ces cellules en couches minces est l'utilisation de substrats légers et flexibles. Cela ouvre de nouvelles applications, notamment dans le domaine de l'habitat, comme par exemple le placement de cellules photovoltaïques sur de grandes toiles à coller sur les murs où les toitures, pour générer de l'électricité.

b) Les couches minces organiques

Les cellules photovoltaïques organiques sont constituées d'une ou plusieurs couches minces de semi-conducteurs organiques. Ces cellules sont encore au stade du laboratoire et présentent déjà de nombreux avantages notoires : une réduction drastique des coûts de fabrication, un faible impact environnemental et une grande flexibilité d'utilisation. Leur développement à grande échelle est aujourd'hui freiné par la faible durée de vie des cellules et les faibles rendements qui les rendent difficilement compétitives avec les autres technologies. Les rendements maximaux actuels sont de l'ordre de 11% pour une cellule et environ 9% pour les modules [3]. Les applications visées sont principalement des usages couvrant de grandes surfaces sur substrats flexibles et également des usages comme l'électronique grand public, le transport, les panneaux publicitaires et dans le bâtiment.

Un autre domaine de recherche sur le solaire, plus récent, concerne les cellule photovoltaïque à base de pérovskites. Il s'agit d'un type de cellule photovoltaïque qui comprend un élément chimique ayant une structure de pérovskite, le plus souvent un hybride organique-inorganique de plomb ou un halogénure d'étain, dans sa couche active. C'est une nouvelle technologie pleine de promesses, mais elle se heurte également à des verrous très importants, comme leur mauvaise résistance à l'eau. Actuellement le rendement record obtenu en laboratoire est de 19,7% [11].

c) Les couches minces à base de matériaux III-V

À côté de toutes ces filières, on trouve aussi celle des matériaux III-V, très performante. Les semi-conducteurs III-V sont des matériaux composés d'un ou plusieurs éléments de la colonne III et de la colonne V du tableau périodique de Mendeleïev, tels que l'arséniure

de gallium, arséniure d'indium, nitrure de gallium, antimoniure de gallium ou des alliages ternaires tels que $In_xGa_{(1-x)}As$. Ils présentent généralement une haute mobilité électronique et une bande interdite directe. Après le Silicium, ce sont les deuxièmes matériaux semi-conducteurs les plus utilisés dans l'industrie des semi-conducteurs.

Les cellules solaires III-V sont essentiellement utilisées pour les systèmes multijonction dans le but d'augmenter le rendement de la cellule solaire, en superposition de multiples cellules ayant des bandes d'énergie interdites différentes permettant ainsi une absorption plus large du spectre solaire. En effet, comme la composition de l'alliage III-V détermine son énergie de bande interdite, on peut donc plus facilement concevoir une cellule multijonction avec différentes bandes interdites. La première jonction doit avoir une largeur de bande interdite pour absorber les photons les plus énergiques (UV) et rester transparente aux autres. La seconde jonction est adaptée pour les photons moins énergiques et ainsi de suite. C'est une technologie, à l'origine, utilisée pour des applications spatiales avant le développement aujourd'hui, des modules photovoltaïques pour les applications terrestres.

Ces cellules multijonctions peuvent certes donner des meilleurs rendements mais ils ont aussi des coûts de fabrication élevés, ce qui limite leur application au niveau spatial et militaire. Afin de diminuer ces coûts, on utilise pour cette technologie, des cellules solaires sous forte concentration lumineuse. Cela consiste à capter le rayonnement solaire grâce à une série de dispositifs optiques (lentilles ou miroirs) pour le concentrer sur une cellule solaire de faible surface. La concentration varie de 2 à plus de 1000 fois la puissance lumineuse émise par le soleil. Elle s'exprime en unité dite "soleil" ("sun") qui indique par combien la densité de puissance incidente du soleil est multipliée. Comme le montre la figure I.6 page 13, le rendement maximal des cellules à base de silicium est d'environ 25%, et peut atteindre 28% pour les cellules sous concentration, alors que les cellules multijonctions à base de III-V approchent les 46% de rendement sous concentration [3].

Les cellules solaires à base de matériaux III-V répondent alors aux deux principales problématiques de recherche de la filière photovoltaïque, à savoir :

- L'augmentation du rendement de conversion des cellules photovoltaïques, avec notamment la conception de nouvelles structures et l'utilisation de cellules multijonctions, ce qui permet une meilleure exploitation du spectre solaire et une augmenta-

tion de la densité de courant produite.

- La baisse des coûts de fabrication des cellules photovoltaïques, par l'utilisation de cellules en couches minces.

Cette thèse se positionne donc sur ce type de matériaux, notamment sur le Nitrure de Gallium et d'Indium (InGaN) que nous décrivons dans la partie suivante.

Nous avons, dans la figure I.8 ci-dessous, représenté quelques exemples d'applications de cellules solaires photovoltaïques.



FIGURE I.8 – Quelques exemples d'applications de cellules solaires photovoltaïques :

- a) Avion 100% solaire du projet Solar Impulse, qui a bouclé un tour du monde en 2016 [12].
 b) Panneaux solaires flottants dans le réservoir du parc industriel d'Okegawa (Japon), la centrale devrait produire environ 1,2 MW par an [13]. c) Tronçon routier de 1 km recouvert de panneaux photovoltaïques en Normandie (France) [14]. d) Batterie nomade solaire, pour smartphone, produite par InfinityPV, une société Danoise, utilisant des cellules solaires organiques imprimées [15].

I.2 Le Nitrure de Gallium Indium (InGaN)

Dans cette deuxième partie, nous allons présenter le nitrure de gallium-indium (InGaN). Ce matériau est un semi-conducteur faisant partie des composés III-N, c'est-à-dire, composés d'azote et d'un ou plusieurs éléments de la colonne III (bore, gallium, aluminium, indium, etc.) du tableau périodique de Mendeleïev. C'est un alliage entre le nitrure d'indium (InN) et le nitrure de gallium (GaN). Nous allons donc décrire les propriétés de ces deux semi-conducteurs binaires, pour ensuite décrire les propriétés de l'alliage ternaire résultant. Les nitrures d'élément III présentent de nombreuses difficultés technologiques comme l'absence de substrat en accord de maille pour l'épitaxie⁴ et la difficulté d'obtenir le dopage de type P. Dans cette partie, nous passerons donc en revue certaines de ces difficultés, ensuite nous présenterons le potentiel d'InGaN pour le photovoltaïque et l'état de l'art dans ce domaine.

I.2.1 Les propriétés structurales

I.2.1.1 La structure cristallographique

Les nitrures-III cristallisent principalement dans la structure zinc-blende ou wurtzite. La structure zinc-blende est une structure cubique alors que la structure wurtzite est une structure hexagonale [16]. Ces deux types de structure sont constitués de deux sous-réseaux interpénétrés, l'un étant formé par des cations d'éléments III (B^{3+} , Al^{3+} , Ga^{3+} , In^{3+} ...) et l'autre par les anions atomes d'azote (N^{3-}). D'un point de vue cristallin, ces deux structures sont donc relativement proches; la phase hexagonale de direction cristallographique [0001] diffère de la phase cubique de direction [111] uniquement par la séquence d'empilement des plans cristallins (voir Figure I.9).

Dans ce travail de recherche, nous allons uniquement considérer la structure wurtzite qui est thermodynamiquement la plus stable, contrairement à la structure cubique qui est métastable [16]. Cependant la structure wurtzite est non-centrosymétrique. En effet les barycentres de deux sous-réseaux d'anions et de cations formant la structure ne se superposent pas, créant ainsi une polarisation interne dans le matériau.

4. Technique pour faire croître une couche de matériau cristallin sur un substrat.

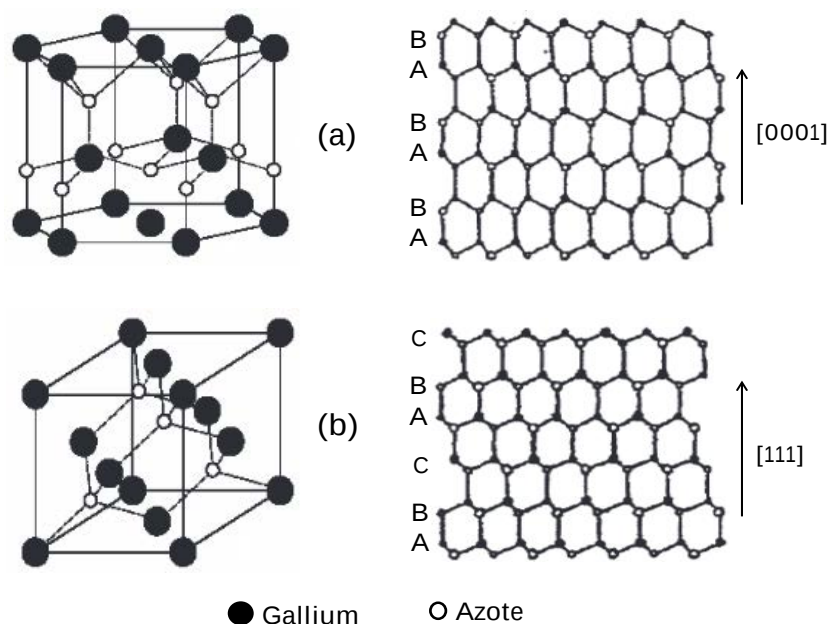


FIGURE I.9 – Structures cristallines et les séquences d'empilement des plans cristallins du GaN. (a) structure wurtzite, (b) structure zinc-blende [17].

I.2.1.2 La polarisation

La non superposition des barycentres des charges positives avec celui des charges négatives dans les structures wurtzites a des conséquences importantes sur les propriétés de polarisation. Deux types de polarisations sont ainsi observés dans les nitrures d'éléments III, l'une existant à l'équilibre (la polarisation spontanée), l'autre sous l'action d'une contrainte extérieure (la polarisation piézoélectrique).

En l'absence de toute contrainte extérieure dans une couche de nitrure de structure wurtzite, celui-ci peut présenter une polarisation spontanée. Cette dernière s'explique par le fait que la structure wurtzite n'est pas symétrique par rapport au plan (0001). En effet, lors de la croissance d'une couche GaN, par exemple, il peut y avoir deux arrangements possibles des atomes de gallium et d'azote. Dans la direction de croissance [0001], la dernière couche atomique déposée sera composée d'atomes de gallium, on dit que l'on a une polarité gallium ou face Ga [18]. Inversement, dans la direction de croissance $[000\bar{1}]$, la dernière couche atomique déposée sera composée d'azote, on dit alors qu'on a une polarité azote ou face N (Voir figure I.10).

En somme, la polarisation spontanée va entraîner une séparation spatiale des porteurs de charges, créant ainsi une accumulation de charges aux interfaces qui peut chan-

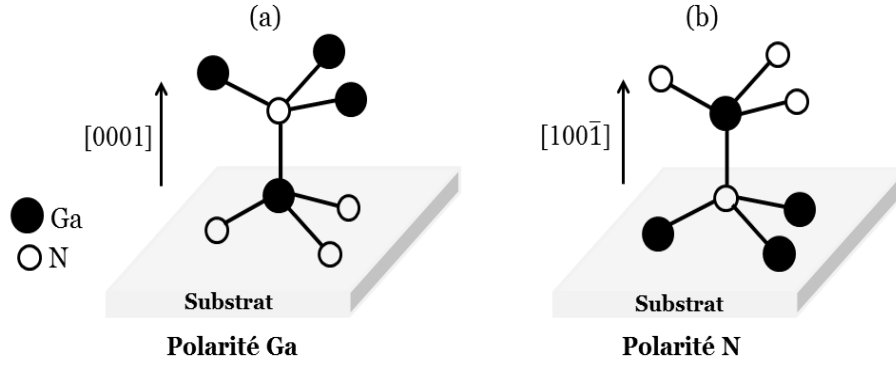
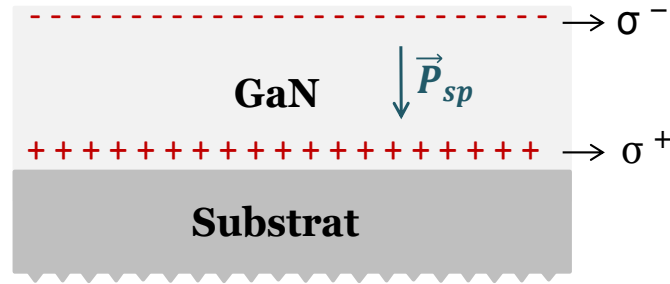


FIGURE I.10 – Polarisations Ga et N pour le GaN hexagonal.


 FIGURE I.11 – Génération de la densité surfacique de charge (σ) par la polarisation spontanée dans un cristal GaN wurtzite polarité gallium.

ger les propriétés électriques du matériau (Figure I.11).

Pour le nitrure de gallium indium (InGaN), la polarisation spontanée (P_{sp}) est modélisée par une interpolation quadratique reliant les valeurs des P_{sp} des deux éléments binaires qui le composent (InN et GaN) et la composition d'indium (x) avec un paramètre de courbure $b = 0,038 \text{ C/m}^2$ [19]. On a donc l'expression suivante.

$$P_{sp}(\text{InGaN}) = x \times P_{sp}(\text{InN}) + (1 - x) \times P_{sp}(\text{GaN}) - b \times x \times (1 - x), \quad (\text{I.4})$$

où x est la concentration en indium dans $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, b est le paramètre de courbure, $P_{sp}(\text{InGaN})$ est la polarisation spontanée de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, $P_{sp}(\text{InN})$ et $P_{sp}(\text{GaN})$ sont les polarisations spontanées de InN et GaN respectivement. Leurs valeurs sont reportées dans le tableau I.1.

	InN		GaN	
$P_{sp}(\text{C/m}^2)$	Vurgaftman et al. [20]	Bernardini et al. [21]	Vurgaftman et al. [20]	Bernardini et al. [21]
	-0,042	-0,032	-0,034	-0,029

TABLEAU I.1 – Valeurs de la polarisation spontanée pour le GaN et l'InN.

Outre la polarisation interne, la déformation de la maille cristalline sous l'effet d'une contrainte (tension ou compression) entraîne l'apparition d'une polarisation piézoélectrique (P_{pi}) dans le matériau [21]. Cette polarisation est définie comme la création d'un champ électrique suite à la déformation de la maille. Cette déformation est généralement due au désaccord de maille entre le matériau et le substrat lors de la croissance épitaxiale. L'effet inverse existe également, à savoir la création de déformations mécaniques lorsqu'on applique un champ électrique dans le matériau.

Comme la polarisation spontanée, la polarisation piézoélectrique trouve essentiellement son origine dans la non centrosymétrie de la structure cristalline et la nature fortement ionique des liaisons chimiques. Cependant, elle n'est pas orientée forcément dans la même direction que la polarisation spontanée. Sa direction dépend de la nature de la déformation, si le matériau subit une déformation en compression ou une déformation en tension. La polarisation piézoélectrique va donc, selon sa direction, renforcer ou affaiblir la polarisation spontanée.

Pour l'alliage InGaN, la polarisation piézoélectrique peut être calculée à partir d'une interpolation linéaire (loi de Vegard) du type [19] :

$$P_{pi}(\text{InGaN}) = xP_{pi}(\text{InN}) + (1 - x)P_{pi}(\text{GaN}), \quad (\text{I.5})$$

où x est la concentration d'indium dans $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, $P_{pi}(\text{InGaN})$ est la polarisation piézoélectrique de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, $P_{pi}(\text{InN})$ et $P_{pi}(\text{GaN})$ sont les polarisations piézoélectriques de InN et GaN.

La polarisation piézoélectrique dépend de la déformation du paramètre de maille et peut s'exprimer par la relation suivante [21] :

$$P_{pi} = 2 \times \frac{a_s - a_0}{a_0} \times (e_{31} - \frac{c_{13}}{c_{33}} \times e_{33}), \quad (\text{I.6})$$

où a_s est le paramètre de maille du substrat et a_0 , celui de la couche épitaxiée. e_{31} et e_{33} sont des constantes piézoélectriques, c_{13} et c_{33} sont des constantes élastiques [GPa].

Les valeurs des paramètres piézoélectriques et élastiques du GaN et de l'InN sont reportées dans le tableau I.2, on peut remarquer que la valeur de cette expression ($e_{31} - \frac{c_{13}}{c_{33}} \times e_{33}$) est toujours négative. Le signe de la polarisation piézoélectrique des nitrures

	e_{33} (C/m ²)	e_{31} (C/m ²)	c_{13} (GPa)	c_{33} (GPa)
InN [22]	0,81	-0,41	94	200
[23]	0,97	-0,57	92	224
GaN [22]	0,67	-0,34	100	392
[23]	1,27	-0,35	106	398

TABLEAU I.2 – Paramètres piézoélectriques et élastiques du GaN et de l'InN.

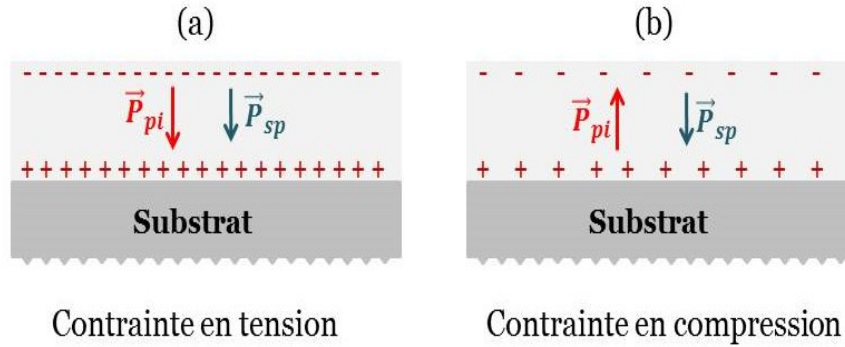


FIGURE I.12 – Orientation de la polarisation piézoélectrique et de la polarisation spontanée d'une couche d'InGaN polarité Gallium contrainte en tension a) et contrainte en compression b).

d'éléments III dépend donc du signe de l'expression $(a_s - a_0)$. Si $a_s > a_0$, la structure est en tension sur son substrat, P_{pi} est négative. Si $a_s < a_0$, structure en compression, P_{pi} est positive.

La polarisation totale (P_{totale}) du matériau InGaN est alors la somme des polarisations spontanée et piézoélectrique :

$$P_{totale} = P_{sp} + P_{pi}. \quad (I.7)$$

Considérons une couche d'InGaN de polarité gallium élaborée sur un substrat. Deux cas de figure peuvent se présenter : dans le cas où la couche d'InGaN est en tension, la polarisation spontanée et la polarisation piézoélectrique seront de même sens et la polarisation totale dans le matériau se verra augmenter. Par contre, si la couche d'InGaN est en compression, les deux polarisations seront de sens opposés et la polarisation totale va diminuer (Figure I.12).

Cette polarisation du matériau peut interférer dans le comportement d'une cellule solaire selon l'orientation et l'intensité de la polarisation, et avoir, selon les cas, un effet néfaste ou bénéfique sur les performances photovoltaïques.

I.2.1.3 Les propriétés optiques du matériau

Les propriétés optiques d'un matériau recouvrent les propriétés dues à l'interaction du matériau avec la lumière. Il s'agit essentiellement de l'indice de réfraction et du coefficient d'absorption du matériau, paramètres essentiels dans le cas de cellules solaires.

La définition de l'indice de réfraction d'un matériau est donnée par un nombre complexe qui s'écrit sous la forme :

$$\tilde{n}(\lambda) = n(\lambda) - ik(\lambda), \quad (\text{I.8})$$

où n est la partie réelle de l'indice de réfraction, λ est la longueur d'onde et k le coefficient d'extinction qui traduit l'absorption.

L'indice de réfraction d'un matériau dépend de la longueur d'onde de la lumière d'excitation. Pour InGa_N, il peut être estimé par une interpolation quadratique reliant les valeurs de l'indice du InN et du GaN avec un paramètre de courbure [24].

Le coefficient d'absorption est un paramètre important pour les cellules solaires décrit notamment par la partie imaginaire de l'indice de réfraction (k). Il permet de déterminer la profondeur de pénétration du rayonnement et l'épaisseur de matériau nécessaire. L'absorption va ainsi déterminer la fraction de photons absorbés et donc la quantité de paires électron-trou photogénérés.

Si un faisceau de lumière d'intensité I_i tombe sur le matériau, une fraction de cette intensité (I_t) sera transmise à l'intérieur. Pour une couche de semi-conducteur d'épaisseur (d), l'intensité transmise (I_t) peut être décrite par la relation suivante (loi de Beer-Lambert) :

$$I_t(\lambda) = I_i(\lambda) \times \exp(-\alpha(\lambda)d). \quad (\text{I.9})$$

Où λ est la longueur d'onde et α le coefficient qui est lié au coefficient d'extinction (k) par la relations suivante :

$$\alpha(\lambda) = \frac{4\pi k(\lambda)}{\lambda}. \quad (\text{I.10})$$

Concernant l'alliage InGa_N, Hori et al. [25] ont montré les variations des coefficients

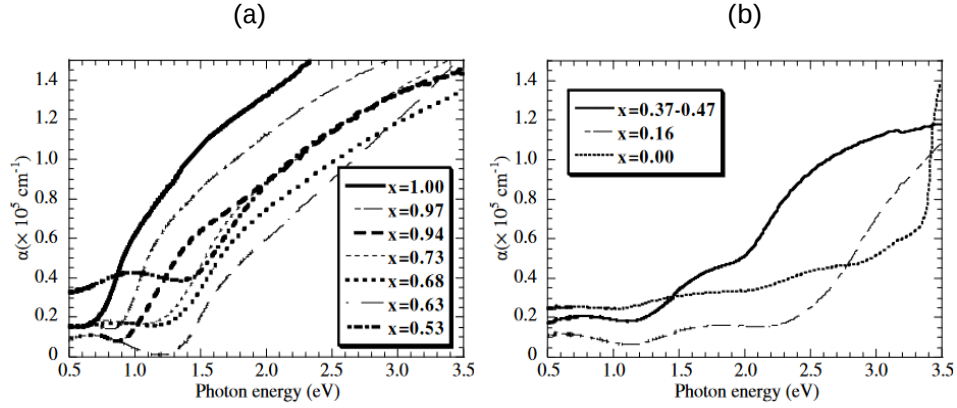


FIGURE I.13 – Courbes d'absorption de couches d'InGaN élaborées avec différentes compositions d'indium; a) avec des fortes concentrations d'indium, b) avec des faibles concentrations d'indium [25].

d'absorption dans InGaN pour différentes compositions d'indium (Figure I.13). Les études précédentes ont aussi montré que l'alliage InGaN a un coefficient d'absorption (de l'ordre de 10^5 cm^{-1}) dix fois plus élevé que celui du silicium monocristallin. Ce qui fait de l'alliage InGaN un matériau de choix pour la fabrication de cellules photovoltaïques en couches minces.

I.2.2 Les propriétés électriques

I.2.2.1 L'expression du gap de l' $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$

Comme les autres nitrures, la principale caractéristique d'InGaN, pour laquelle il est largement étudié est sa bande d'énergie interdite (gap) directe [26]. Cette dernière peut être exprimée selon la loi de Vegard modifiée qui relie les valeurs des bandes interdites de InN et du GaN. InN et GaN sont tous deux des matériaux à gap direct. On parle de semi-conducteur à gap direct lorsque le maximum de la bande de valence est aligné au minimum de la bande de conduction dans l'espace des vecteurs d'onde des électrons. Inversement, on parle de semi-conducteur à gap indirect lorsque le maximum de bande de valence et le minimum de la bande de conduction se situent à des valeurs distinctes dans l'espace des vecteurs d'onde.

Après plusieurs années de controverse, la structure de bande de l'InN est maintenant bien établie avec une bande d'énergie interdite de 0,7 eV [27]. Pour GaN, la bande d'énergie interdite est de 3,42 eV [27].

La loi de Vegard utilisée pour déterminer le gap d'InGaN est une loi empirique indiquant que les valeurs des propriétés d'un alliage (bande d'énergie interdite, paramètre de maille, constantes élastiques, etc.) peuvent être déterminées par une interpolation linéaire des valeurs des propriétés de ses composants. Cependant, pour le gap d'InGaN, les valeurs mesurées ne sont pas en totale adéquation avec les valeurs obtenues avec l'interpolation linéaire, on introduit alors un paramètre de courbure dans l'expression afin de suivre les données expérimentales. Le gap d'InGaN est donc donné par une loi de Vegard avec un paramètre de courbure[27–29] :

$$E_g^{InGaN} = x.E_g^{InN} + (1-x)E_g^{GaN} - x.b.(1-x), \quad (I.11)$$

où E_g^{InGaN} est la bande d'énergie interdite d'InGaN, E_g^{InN} et E_g^{GaN} sont les bandes d'énergie interdites d'InN et GaN, x est la concentration d'indium dans $In_xGa_{(1-x)}N$ et b le paramètre de courbure.

Il faut noter que les mesures de la bande interdite d'InGaN n'ont été faites que pour des gammes limitées de composition en Indium et qu'il existe une disparité importante des valeurs du paramètre de courbure (b) reportées dans la littérature. Cette disparité peut être attribuée à plusieurs facteurs : la valeur du gap d'InN considérée, la méthode de mesure du gap d'InGaN, ou encore l'effet des contraintes.

1.2.2.2 Les phénomènes de recombinaison

Le fonctionnement d'une cellule solaire est basé sur la création et la séparation des paires électron-trou par absorption de la lumière et sous l'action d'un champ électrique. Néanmoins, il existe toujours des recombinaisons de ces paires électron-trou limitant les performances de la cellule. Dans un matériau semi-conducteur, un mécanisme de recombinaison donné est caractérisé par un taux de recombinaison, représentant le nombre de recombinaisons par unité de temps et par unité de volume. Il existe trois principaux mécanismes : les recombinaisons radiatives, les recombinaisons Shockley-Read-Hall et les recombinaisons Auger.

a) Recombinaisons radiatives

La recombinaison radiative ou bande à bande, correspond à la transition d'un électron de la bande de conduction vers la bande de valence. Elle s'accompagne de l'émis-

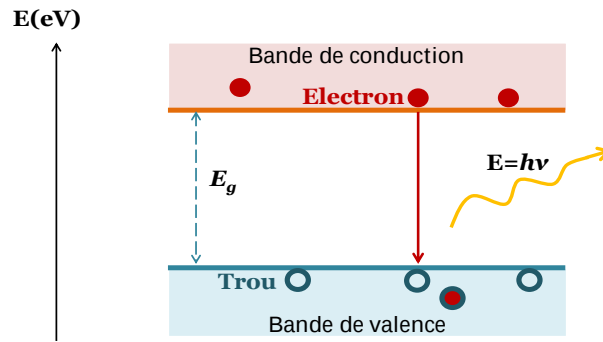


FIGURE I.14 – Mécanisme de recombinaison radiative

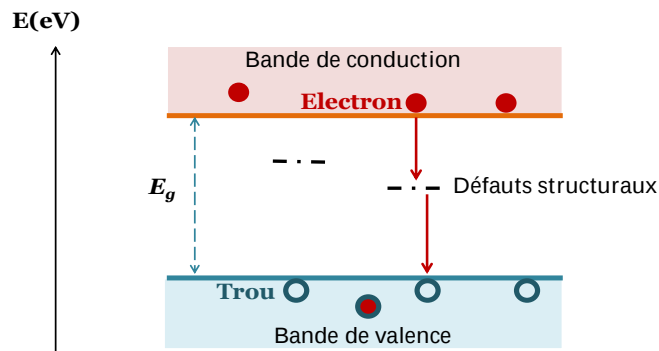


FIGURE I.15 – Mécanisme de recombinaison Schokley-Read-Hall (SRH)

sion d'un photon d'énergie proche de celle du gap du matériau (processus inverse de la photogénération) [30] (voir Figure I.14).

Ce type de recombinaison est un processus fréquent dans les semi-conducteurs à gap direct tels que les nitrures [31]. A noter qu'il est à la base de la photoluminescence et des LEDs.

b) Recombinaisons Shockley-Read-Hall (SRH)

Le mécanisme de recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH) est schématisé sur la figure I.15. Ce mécanisme fait intervenir un défaut localisé dans la bande interdite du matériau qui peut être un centre recombinant pour les porteurs libres [30]. Les défauts de ce type sont prépondérants dans les matériaux nitrures et ce mécanisme jouera donc un rôle important dans le fonctionnement des cellules solaires basées sur ces matériaux.

c) Recombinaisons Auger

Le mécanisme de recombinaison Auger est représenté sur la figure I.16. Il s'agit aussi d'une recombinaison bande à bande, mais contrairement à la recombinaison radiative,

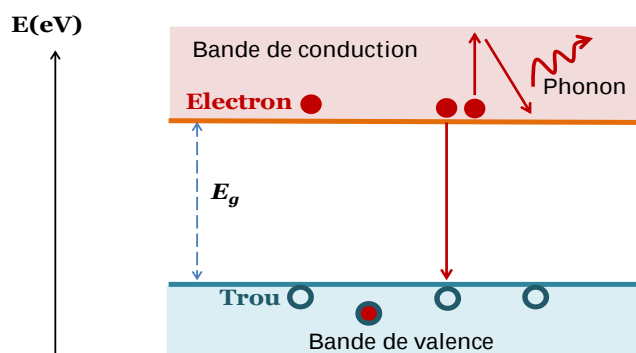


FIGURE I.16 – Mécanisme de recombinaison Auger

	Al_2O_3	6H-SiC	GaN	AlN
Paramètre de maille a (300 K)	4,76	3,08	3,19	3,1
Déssaccord paramétrique/GaN	-16%	-3,4%	0%	-2,40%
Coeff. d'expansion thermique ($\times 10^{-6}/K$)	5,8	4,46	5,6	2,9

TABLEAU I.3 – Caractéristiques physiques des substrats utilisés pour la croissance du GaN [34].

l'énergie libérée est transmise à un troisième porteur qui se retrouve excité dans un niveau supérieur de la bande de conduction. Le troisième porteur peut ensuite se thermaliser en émettant un ou plusieurs phonons. A noter que ce phénomène existe aussi avec les trous dans la bande de valence [30].

Ce type de recombinaison est peu probable dans les matériaux à grand gap tel que le GaN et donc peu probable dans InGaN riche en gallium.

I.2.3 L'élaboration d'InGaN

I.2.3.1 Le substrat pour l'hétéroépitaxie

L'élaboration d'InGaN est un point critique pour le développement des cellules solaires à base de ce matériau. Aujourd'hui il est très difficile de fabriquer une couche massive d'InGaN. Elle est donc déposée en film mince sur un substrat. Cependant InGaN souffre d'un manque de substrat en accord de maille pour la croissance épitaxiale. Une couche tampon est alors utilisée pour adapter les paramètres du substrat et de la couche d'InGaN déposée. Les substrats traditionnellement utilisés sont le saphir (Al_2O_3) et le carbure de silicium (SiC), avec une couche tampon de GaN ou d'AlN [32, 33]. Le tableau I.3 résume les principales caractéristiques de ces substrats.

Le nitrure l'aluminium (AlN) a été aussi étudié pour la croissance d'InGaN. Cepen-

dant, il est également très difficile à fabriquer en couches épaisses. Enfin, d'autres substrats comme le silicium [35] ou le verre pourraient être utilisés comme substrat pour des composants InGaN malgré leur structure très différente, grâce à leur faible coût et leurs diverses applications [36].

Tous ces substrats possèdent des paramètres de maille et des coefficients d'expansion thermique éloignés de ceux de la couche tampon de GaN, induisant ainsi une densité élevée de défauts structuraux qui sont principalement des dislocations qui impactent très fortement les performances d'une cellule solaire [37].

Deux techniques d'épitaxie sont utilisées pour la croissance des nitrures-III notamment InGaN : l'épitaxie en phase vapeur aux organométalliques (MOVPE) et l'épitaxie par jet moléculaire (MBE). Cette dernière s'effectue sous un vide très poussé et consiste à envoyer les éléments qui constituent le matériau par jets de molécules sur un substrat chauffé. La technique MBE permet d'avoir de meilleures qualités cristallines, cependant la croissance est beaucoup plus lente. C'est pour cela que c'est la technique MOVPE qui est la plus utilisée pour la croissance des nitrure-III car possédant de grandes vitesses de croissance. Cette technique consiste à déposer l'élément à épitaxier, sous forme d'organométallique sur le substrat par l'intermédiaire d'un gaz vecteur. Pour l'épitaxie des composés contenant du Gallium, comme GaN, la source organométallique utilisée le plus souvent est le triméthylgallium ($\text{Ga}(\text{CH}_3)_3$) avec l'hydrogène comme gaz vecteur [38].

I.2.3.2 L'épaisseur critique

Lors de la croissance épitaxiale d'un matériau sur un substrat et ce, pour un faible désaccord des paramètres de maille entre le matériau et le substrat, il existe une épaisseur dite "épaisseur critique" à partir de laquelle la contrainte contenue dans la couche devient trop importante et la couche se relaxe pour réduire l'énergie emmagasinée.

Pour une couche épitaxiée d'épaisseur inférieure à l'épaisseur critique, la couche se déforme élastiquement pour adapter son paramètre de maille à celui du substrat (épitaxie pseudomorphe). Inversement, pour une couche épitaxiée supérieure à l'épaisseur critique, la couche se relaxe. En effet, l'énergie élastique emmagasinée étant trop grande, la couche se relaxe pour reprendre ses paramètres de maille initiaux, en générant des dislocations dans la matériau [39]. L'épaisseur critique dépend donc fortement du désaccord

de maille entre la couche épitaxiée et son substrat,

Différentes études ont été réalisées pour mesurer l'épaisseur critique de relaxation (h_c) de InGaN sur GaN en fonction de la composition d'indium [40–43]. Il existe cependant, une grande disparité des mesures due aux différents procédés et conditions de croissance et aux différents modèles théoriques utilisés.

I.2.3.3 Défauts structuraux

Les couches de nitrure épitaxiées présentent une quantité importante de défauts structuraux. Ils ont une incidence directe sur les propriétés électriques du semi-conducteur et des composants associés. Ces défauts peuvent être classés en deux catégories : les défauts ponctuels (les lacunes, les anti-sites, les impuretés par substitution, les défauts interstitiels) et les défauts étendus qui sont généralement des dislocations dues au substrat en désaccord de maille [44].

John L. Lyons et al. [45] ont décrit les propriétés des différents types de défauts (lacunes, défauts interstitiels, les anti-sites) présents dans InGaN ainsi que leur interaction avec les impuretés. Ils ont présenté dans la figure I.17, les courbes représentant l'énergie de formation des différents défauts en fonction du niveau de Fermi dans les conditions de croissance riche gallium. Le niveau de Fermi égal à 0 eV représente le haut de la bande de valence (conditions de fort dopage P) et le niveau de Fermi situé à 3,4 eV (gap du GaN), représente le bas de la bande de conduction (conditions de fort dopage N).

Ces résultats montrent que les lacunes d'azote (V_N) sont statistiquement présentes dans GaN et que les lacunes de gallium sont plutôt présentes dans le cas d'un dopage P. Dans le cas de l'InN, les travaux de Janotti et al. [46], repris sur la figure I.18, ont montré que ce sont les lacunes d'azote (V_N) qui sont présentes, tout comme dans GaN, et seront majoritaires dans les couches InN de type P. Les autres défauts (les lacunes d'indium, les interstitiels, les anti-sites) possèdent des énergies de formations plus élevées et sont donc moins favorables dans InN.

Feng-Qi et al. [47] ont, eux aussi, calculé les énergies de formations des défauts ponctuels dans InN de type wurtzite en considérant différentes conditions de croissance. Ils ont montré que dans les conditions riches en azote ($N/In > 1$), ce sont les atomes d'azote

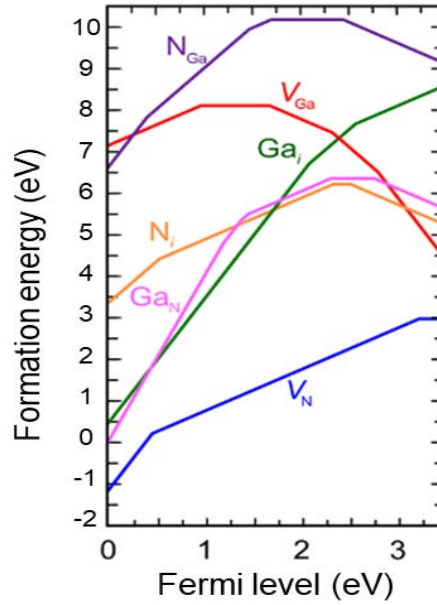


FIGURE I.17 – Énergie de formation des défauts natifs dans GaN sous conditions riches en azote en fonction du niveau de Fermi. $E_F = 0$ correspond au maximum de la bande de valence [45].

interstitiels qui sont les plus favorables et dans les conditions riches en Indium ($N/In < 1$), les lacunes d'azote (V_N) ont des énergies de formation bien plus faibles que les autres défauts.

Ainsi, comme dans GaN, on peut remarquer que les lacunes d'azotes ont un rôle important dans les défauts natifs de InN. InGaN étant l'alliage ternaire de ces deux éléments binaires (InN, GaN) et faute d'études expérimentales spécifiques dans l'ensemble de la gamme de composition d'indium, on peut alors supposer que InGaN présente les mêmes types de défauts natifs.

En plus des défauts ponctuels, il apparaît dans InGaN, lors de la croissance du matériau, une forte concentration de dislocations due à l'utilisation de substrats fortement désaccordés. Pour le GaN par exemple, les densités de dislocations observées sont de l'ordre de 10^8 à 10^{10} cm^{-2} [48, 49]. Le désordre provoqué dans le matériau par ces nombreuses dislocations, mais aussi par les fortes concentrations d'indium, va se traduire par une densité d'états relativement importante dans la bande interdite [50]. Parmi ces états, on distingue les queues de bande, définies comme étant des états localisés en bords de bandes de conduction et de valence dont la largeur reflète l'importance du désordre au sein du matériau. Nous discuterons un peu plus loin de leur influence sur les performances d'une cellule solaire.

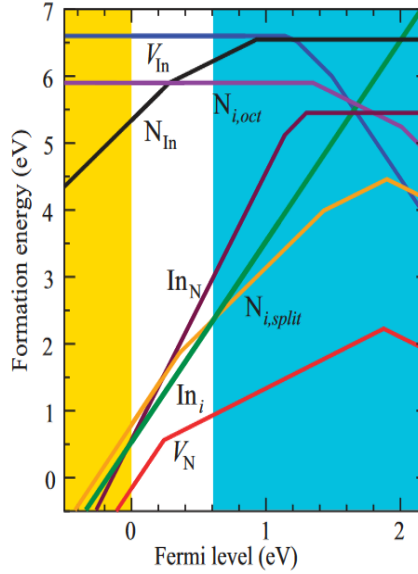


FIGURE I.18 – Énergie de formation des défauts natifs dans InN sous conditions riches en indium en fonction du niveau de Fermi. $E_F = 0$ correspond au maximum de la bande de valence [46].

I.2.3.4 Le dopage résiduel dans les nitrures

Les nombreux travaux de caractérisation électrique par effet Hall ont montré un dopage de type N résiduel (non-intentionnel) dans les nitrures avec une concentration d'électrons qui dépend des conditions d'élaboration des couches [51, 52]. Ce dopage résiduel a été attribué aux défauts telles que les lacunes d'azote [26, 53, 54] ou encore à des impuretés incorporées durant l'élaboration, telles que l'oxygène ou le silicium [55]. La nature exacte de ce dopage résiduel reste encore à déterminer et sa dépendance avec les conditions d'élaboration rend son étude difficile. L'impact de ce dopage non-intentionnel est bien entendu très important pour le composant et la cellule solaire notamment, en particulier lorsqu'il s'agit d'élaborer des couches de nitrures dopées P ou des couches intrinsèques.

I.2.3.5 Le dopage

Les cellules solaires comme quasiment tous les composants électroniques ont comme élément de base une jonction entre une couche de semi-conducteur de type P et une couche de semi-conducteur de type N (jonction PN). Il est donc important d'avoir de bons dopages (type N et P) afin d'obtenir des dispositifs efficaces. Nous avons vu précédemment que les nitrures sont intrinsèquement de type N. Ceci fait que le dopage de type N est relativement facile à obtenir et que le dopage de type P est plus compliqué à

atteindre.

Le dopage de type N dans les nitrures est couramment réalisé avec le silicium. La solubilité du silicium dans le GaN par exemple, est de l'ordre de 10^{20}cm^{-3} , il est donc adapté au dopage des nitrures, et le dopage N du GaN est actuellement bien maîtrisé. L'énergie d'activation du silicium n'est pas déterminée précisément, elle est généralement donnée entre 10 et 30meV.

Le dopage de type P reste toujours un défi majeur pour le développement des nitrures. En effet, du fait du caractère intrinsèque de type N des nitrures (InN, GaN et InGaN), il faut dans un premier temps compenser les électrons en excès présents dans le matériau, avant d'arriver à créer un excès de trous [56]. Le dopage P est généralement obtenu en incorporant du magnésium (Mg) comme accepteur avec un procédé complexe d'activation à haute température. Les résultats expérimentaux donnent une valeur limite à l'incorporation du Mg de quelques 10^{19}cm^{-3} dans le GaN hexagonal avec une concentration de trous plus faible du fait de la forte énergie d'activation des impuretés Mg. Au-delà, la morphologie est dégradée [57].

I.2.4 Cellules solaires à base d'InGaN

Depuis une dizaine d'années déjà, plusieurs études ont été menées sur différentes structures de cellules solaires à base d'InGaN. Ceci, comme nous l'avons déjà souligné, grâce à sa large couverture spectrale accordable couvrant une gamme d'énergie entre 0,7 eV à 3,4 eV et un coefficient d'absorption élevé. Nous allons donc voir dans cette partie, l'état de l'art des cellules solaires à base d'InGaN, d'abord en présentant les structures simples de type PN et PIN qui ont été explorées d'abord et ensuite les structures complexes. Un tableau (I.4) résumera à la fin l'état de l'art des cellules solaires à base InGaN.

I.2.4.1 Cellules solaires à simple jonction

Les structures de cellules solaires PIN⁵ hétérojonctions à base d'InGaN ont été largement étudiées ces dernières années. L'un des premiers travaux sur les cellules solaires a été celui de Jani et al. [58] en 2007. Ils ont fabriqué par MOVPE et étudié une cellule solaire à jonction PIN en double hétérojonction avec une composition d'indium de la couche In-

5. Structure composée d'une couche intrinsèque (I) intercalée entre une couche dopée P et une couche dopée N

GaN de 0,05. Ils ont rapporté un V_{CO} de 2,4 V, un I_{CC} de 3,7mA/cm² et un FF de 0,78. Même si le rendement n'a pas été précisé et ne peut être calculé du fait d'un manque de données sur l'éclairement dans cet article, le V_{CO} élevé montre le potentiel de ce matériau.

Dans la même période, une équipe de l'université de Californie à Santa Barbara [59], a réalisé une autre étude sur structure de cellule solaire PIN à hétérojonction fabriquée aussi par MOVPE. La composition d'indium de la couche InGaN est 0,12. La structure est sous éclairage AM0 et elle fournit les performances suivantes : un V_{CO} de 1,81V, un I_{CC} de 4,2mA/cm² et un FF de 0,753. A partir de ces données, on détermine le rendement de la cellule qui est de l'ordre de 4,1% si on considère que l'éclairement AM0 utilisé est standard. Dans cet article, les auteurs ont montré que le rendement quantique externe⁶ de la cellule peut être amélioré en optimisant le contact métallique interdigité face avant (couche P). Ils ont donc montré que pour un espacement des contacts de 25µm le rendement quantique externe est de 51% alors que pour un espacement de 166µm le rendement quantique est de 63% ce qui améliore les performances de la cellule. On voit donc bien ici l'importance d'optimiser l'espacement des contacts métalliques qui permet en effet de réduire le taux d'ombrage sur la face avant de la cellule solaire.

En 2014, Çakmak et al. [60] ont également étudié une structure PIN avec une couche InGaN à composition d'indium graduée réalisée par MOVPE (voir figure I.19). Ils ont étudié trois échantillons. La composition d'indium varie de 0,088 à 0,071 dans l'échantillon A, de 0,157 à 0,071 dans l'échantillon B et de 0,266 à 0,151 dans l'échantillon C. Les mesures ont été effectuées sous un éclairage AM1.5 et ils ont montré que c'est l'échantillon B qui présente les meilleures performances avec un V_{CO} de 0,25V, un I_{CC} de 6mA/cm² et un FF de 0,391 donnant un rendement de conversion de 0,66%. Cependant, les deux autres échantillons présentent presque les mêmes performances; l'échantillon A présente un rendement de 0,41% et l'échantillon C présente un rendement de 0,22%.

Ces dernières années, une partie des études sur les structures à hétérojonction a concerné les puits quantiques InGaN/GaN. Le but avec ce genre de structures est d'essayer d'améliorer la qualité cristalline de la couche active à base d'InGaN de la cellule. En 2011, Asgari et al. [61] ont simulé une structure P-(MQW)-N sous éclairage AM1.5 et ont obtenu un rendement $\eta = 35\%$ avec une composition d'indium optimale de la couche active de 0,63.

6. Rapport entre le nombre d'électrons collectés et le nombre de photons incidents.

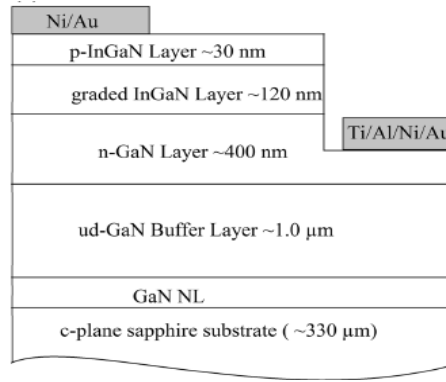


FIGURE I.19 – Schéma de la structure de cellule solaire PIN étudiée par Çakmak et al. [60].

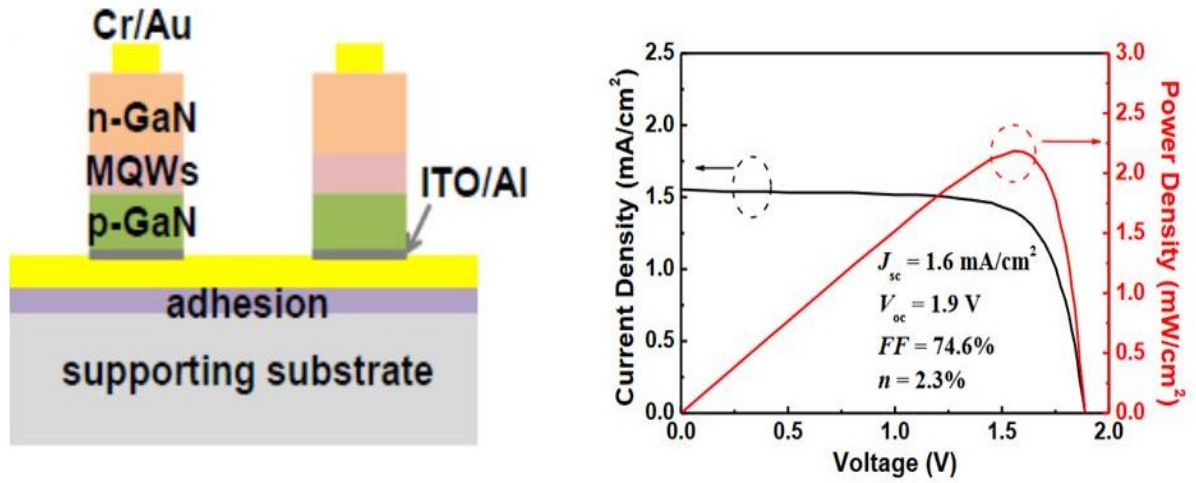


FIGURE I.20 – Schéma de la structure de cellule solaire à puits quantiques étudiée par Zheng et al. et les caractéristiques électriques de la cellule solaire [62].

En 2016, une autre équipe, Zheng et al. [62] ont, quant à eux, élaboré une structure à puits quantiques (GaN-MQWs-GaN) (voir Figure I.21). La cellule sous éclairement AM1.5G présente un V_{CO} de 1,9 V, un I_{CC} de 1,6 mA/cm² et un FF de 0,746, donnant un rendement $\eta = 2,3\%$.

Pour ces deux études, le rendement obtenu expérimentalement reste très en deçà de ce qui est prévu théoriquement. Ceci peut s'expliquer par le fait que la modélisation analytique des phénomènes physiques réalisée par Asgari et al. [61] est loin d'être réaliste. En effet dans leur simulation, les auteurs n'ont pas considéré un certain nombre de phénomènes physiques, notamment les défauts structuraux, ou encore les phénomènes de polarisation et de recombinaisons présents dans les matériaux.

Dernièrement, en 2017, Liu et al. [63] ont étudié deux structures de cellules solaires à puits quantiques InGaN/GaN, l'une avec une composition d'indium de 0,14 (cellule A) et

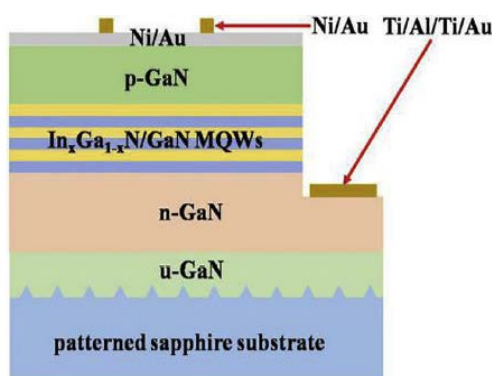


FIGURE I.21 – Schéma de la structure de cellule solaire à puits quantiques InGaN/GaN étudiée par Liu et al [63].

l'autre avec une composition d'indium de 0,19 (cellule B). La cellule A présente un rendement de conversion de 3,56% et pour la cellule B, le rendement de conversion est de 1,04%. Les auteurs ont montré que cette différence est sûrement due à la qualité cristalline. Avec moins d'indium, la cellule A possède probablement une meilleure qualité cristalline que la cellule B. En effet, l'augmentation de la composition d'indium entraîne une dégradation de la qualité cristalline du fait de l'augmentation des défauts structuraux.

Des études ont également été menées sur des structures à homojonction. En 2009, l'équipe de Zeng et al. [64] ont étudié une structure cellule solaire homojonction PIN à base d'InGaN réalisée par MOVPE. Ils ont évalué l'influence du contact ohmique au niveau de la couche P en utilisant deux types de contact : un contact ohmique semi-transparent et un contact ohmique en grille. Ils ont montré que les dispositifs avec contacts semi-transparent ont un FF plus élevé (0,69) que les dispositifs avec des contacts en grille (57.6%). En revanche c'est avec ces derniers qu'ils obtiennent les meilleures performances : un V_{CO} de 2,36 V et un I_{CC} de 1,71 mA/cm². Ce qui indique que les contacts ohmiques en grille permettent de faire passer une plus grande partie des photons incidents que les contacts ohmiques semi-transparent.

En 2013, Islam et al. [65] ont élaboré par MOVPE une structure homojonction N⁺P avec une composition d'indium dans les couches InGaN de 0,16. Ils ont obtenu, sous éclairement AM1.5, les performances suivantes : un V_{CO} de 1,4 V et un I_{CC} de 0,25 mA/cm². Pour améliorer les performances de la cellule, le dispositif est ensuite fabriqué sur un substrat de GaN épais avec une incorporation en indium de 0,25. Cette fois-ci, ils obtiennent un V_{CO} de 1,5 V et un I_{CC} de 0,5 mA/cm². En effet, l'augmentation de la composition d'indium entraîne une diminution de la bande d'énergie interdite et permet une amélio-

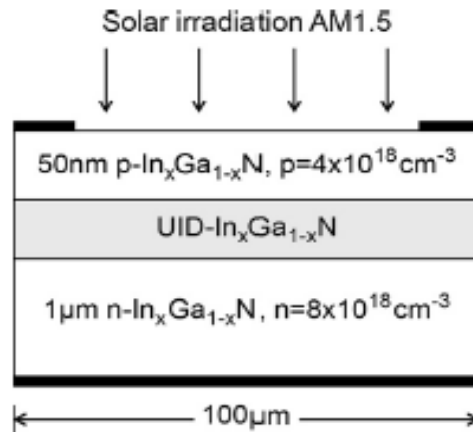


FIGURE I.22 – Schéma de la structure PIN homojonction étudiée par Doolittle et al. [66].

ration du photocourant. Cependant, cela entraîne également une détérioration de la qualité cristalline de la couche InGaN épitaxiée. L'augmentation de l'épaisseur de la couche GaN a donc permis d'améliorer la qualité cristalline de cette couche.

Des simulations numériques sur des cellules InGaN homojonctions ont aussi été réalisées. En 2014, Doolittle et al. [66] ont simulé une structure PIN sous éclairage AM1.5. Ils ont étudié l'effet de la concentration d'indium dans la couche intrinsèque. Le rendement optimal obtenu est de 17% pour une couche intrinsèque de 500 nm d'épaisseur avec une composition d'indium de 55%. Ceci montre que le rendement optimal des cellules solaires à base d'InGaN s'obtient avec de très fortes teneurs en indium dépassant les 50%.

I.2.4.2 Cellules solaires à multijonction

Pour la technologie multijonction à base d'InGaN, des études ont également été réalisées sur différentes structures de cellules solaires. En 2008, Zhang et al. [67] ont simulé une cellule solaire multijonction à base d'InGaN. C'est une structure composée de deux jonctions : la première avec une composition d'indium de 0,48 et la seconde avec une composition d'indium de 0,73. Ils obtiennent un rendement de conversion de 35,1%. Cependant, la jonction tunnel qui devrait relier électriquement les deux sous-cellules n'a pas été considérée dans cette étude, ce qui expliquerait en grande partie ce très haut rendement. De plus, dans leur démarche de modélisation, le rendement quantique interne est égal au rendement quantique externe; aucune perte de photons n'est donc considérée. Les phénomènes de recombinaison, les phénomènes de polarisation et les défauts

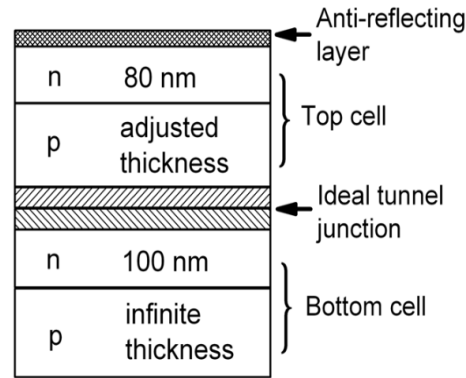


FIGURE I.23 – Schéma de la cellule solaire à double-jonction simulée par Zhang et al. [67].

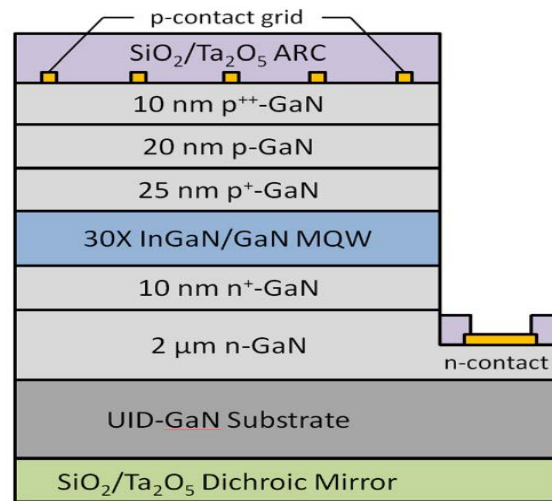


FIGURE I.24 – Schéma de la cellule solaire multijonction proposée par Young et al. [68].

structuraux ne sont pas pris en compte non plus et le coefficient d'absorption est considéré constant en composition d'indium et en longueur d'onde dans toute la structure. La modélisation utilisée par Zhang et al. [67] est donc peu réaliste, ce qui conduit à des performances surestimées.

En 2014, Young et al. [68] ont élaboré par MOVPE, une structure multijonction avec une couche de puits quantiques InGaN/GaN (Figure I.24). Ils ont utilisé un revêtement optique à large bande pour améliorer l'absorption de la lumière. La structure sous éclairciment AM0, fournit un rendement de 3,33% avec un V_{CO} de 2,26 V et un I_{CC} de 2,97 mA/cm².

L'alliage InGaN est également étudié pour réaliser des structures hétérojonctions InGaN/Si. Hsu et al. [69] ont montré par simulation, qu'il est possible d'atteindre les 31% de rendement avec un gap d'InGaN autour de 1,65 eV et une épaisseur de silicium de 20 μm. La structure est une double jonction : une jonction PN à base d'InGaN connectée en série

avec une autre jonction PN à base de silicium. L'étude ne tient pas compte de la jonction tunnel reliant les deux jonctions.

Dans le tableau I.4, nous avons résumé l'état de l'art concernant les différentes structures de cellules solaires à base d'InGaN. Pour chaque type de structure, nous avons reporté les caractéristiques électriques de la cellule ou le rendement obtenu.

Année	Structures	Performances	Réalisation	Ref.
Cellules solaires à hétérojonction à base d'InGaN				
2007	InGaN/GaN (1 soleil)	$V_{CO} = 2,4V$, $I_{CC} = 3,8mA/cm^2$	MOVPE	[58]
2008	InGaN/GaN (AM0)	$V_{CO} = 1,81V$, $I_{CC} = 4,2mA/cm^2$	MOVPE	[59]
2009	Schottky/InGaN/GaN	$V_{CO} = 0,91V$, $I_{CC} = 7mA/cm^2$	MOVPE	[70]
2014	InGaN/GaN (AM1.5G)	$V_{CO} = 0,25V$, $I_{CC} = 6mA/cm^2$	MOVPE	[60]
Cellules solaires P-(MQW)-N à hétérojonction à base d'InGaN				
2010	P-(MQW)-N (AM1.5)	$\eta = 2,9\%$	MOVPE	[71]
2011	P-(MQW)-N (AM1.5)	$\eta = 35\%$	Simulation	[61]
2011	P-(MQW)-N (AM1.5)	$V_{CO} = 1.89V$, $I_{CC} = 1.06mA/cm^2$	MOVPE	[72]
2011	P-(MQW)-N (15O soleil)	$\eta = 2,23\%$	MOVPE	[73]
2016	P-(MQW)-N (AM1.5G)	$\eta = 2,3\%$	MOVPE	[62]
2017	P-(MQW)-N (AM1.5G)	$\eta = 3,56\%$	MOVPE	[63]
Cellules solaires à homojonction à base d'InGaN				
2009	InGaN homo (AM1.5)	$V_{CO} = 2,24V$, $I_{CC} = 1,40mA/cm^2$	MOVPE	[74]
2009	InGaN homo (AM1.5)	$V_{CO} = 2,36V$, $I_{CC} = 1,71mA/cm^2$	MOVPE	[64]
2013	InGaN homo (AM1.5)	$V_{CO} = 1,5V$, $I_{CC} = 0,5mA/cm^2$	MOVPE	[65]
2014	InGaN homo (AM1.5)	$\eta = 17\%$	Simulation	[66]
cellules solaires multijonction à base d'InGaN				
2008	InGaN/Si (AM1.5)	$\eta = 31\%$	Simulation	[69]
2008	InGaN homo (AM1.5)	$\eta = 35,1\%$	Simulation	[67]
2014	InGaN/GaN MQW (AM0)	$\eta = 3,33\%$	MOVPE	[68]

TABEAU I.4 – État de l'art de cellule solaire à base d'InGaN. MOVPE : épitaxie en phase vapeur aux organométalliques.

I.2.4.3 Objectifs de la thèse

L'état de l'art des cellules solaires à base d'InGaN montre que ce matériau possède des atouts indéniables pour la réalisation de cellules solaires à haut rendement. Toutefois, toutes les études expérimentales de différentes cellules solaires à base d'InGaN présentent des rendements bien en dessous des rendements théoriques que l'on pourrait attendre avec cette technologie. Ces faibles performances traduisent principalement trois difficultés : la difficulté de réaliser le dopage de type P, la difficulté d'incorporation de l'indium dans InGaN et la difficulté de réaliser des contacts ohmiques au niveau des couches de dopage de type P.

En vue de contribuer au développement de la technologie InGaN, notre travail est axé sur des simulations numériques de structures cellules solaires dans le but d'en étudier les propriétés, d'en optimiser les performances et de concevoir de nouvelles structures. Ceci grâce notamment à des simulations numériques rigoureuses basées sur les mesures expérimentales, afin d'expliquer les désaccords abordés ici.

Les simulations numériques permettent de prédire les performances d'une cellule solaire avec une facilité de modification des paramètres de la cellule à moindre coût. Cela permet par conséquent de tester des structures innovantes plus facilement. C'est donc évidemment un atout majeur pour valider les structures cellules solaires avant d'effectuer des tests physiques. Ce qui permet de limiter le nombre de prototypes à fabriquer, permettant ainsi de faire des économies d'argent et de temps.

Dans ce travail de thèse, nous allons non seulement simuler des structures cellules solaires conventionnelles, mais également des nouvelles structures permettant de contourner certaines difficultés technologiques actuelles, comme celles liées à l'élaboration de la couche P.

Par ailleurs, afin de connaître les performances optimales de chaque structure de cellule solaire, ces dernières sont optimisées au moyen de méthodes rigoureuses d'optimisation. C'est une démarche d'optimisation *multivariée* que nous verrons plus en détail dans le chapitre qui suit et qui a été utilisée ici pour la première fois dans ce domaine.

Conclusion du chapitre

Dans ce premier chapitre, nous avons présenté le principe de fonctionnement physique d'une cellule solaire et les différentes filières photovoltaïques. Puis nous avons vu les propriétés des nitrures d'éléments III, plus particulièrement d'InGaN. Nous avons pris connaissance de ses avantages (bande interdite directe couvrant une grande partie du spectre solaire, coefficient d'absorption élevé) et également de ses inconvénients (phénomènes de polarisation, concentration de défauts importante, dopage de type P difficile, croissance épitaxiale difficile). Enfin, nous avons présenté l'état de l'art des cellules solaires à base d'InGaN et les objectifs de la thèse. Nous allons maintenant voir, dans le deuxième chapitre, comment nous modélisons et optimisons les différentes structures de cellules solaires étudiées dans ce travail de thèse.

II

Modélisation et optimisation

Sommaire

II.1 Modélisation et simulation numérique	44
II.1.1 Modèle dérive-diffusion	44
II.1.2 Les modélisations physiques	48
II.2 La méthodologie d'optimisation	55
II.2.1 Les différentes méthodes d'optimisation	55
II.2.2 Notre approche : l'optimisation multivariée	58
II.3 La mise en œuvre	68
II.3.1 L'outil de simulation Atlas TM (SILVACO TM)	68
II.3.2 Le programme d'optimisation	71

II.1 Modélisation et simulation numérique

La simulation numérique de structures cellules solaires est un outil d'analyse et d'étude incontournable pour le développement de la technologie photovoltaïque. Elle permet de prédire les comportements et les performances des cellules solaires avant leur fabrication et de visualiser des phénomènes physiques difficilement observables intervenant dans le fonctionnement du composant, tels que les phénomènes de photogénération et de recombinaison des porteurs et la distribution du champ électrique. En outre, la modélisation et la simulation numérique des cellules solaires permettent de réduire considérablement les cycles d'élaboration, de définir des objectifs technologiques précis afin de minimiser les coûts de développement. Pour ce faire, il est très important que les modèles physiques utilisés, soient les plus réalistes possibles. Ces modèles doivent donc rigoureusement reposer sur des paramètres expérimentaux réels.

Dans ce second chapitre, la première partie est consacrée à la présentation des modèles physiques utilisés pour décrire les structures de cellules solaires. La deuxième partie est consacrée à la description des méthodes permettant de les optimiser. Enfin, dans la dernière partie, les outils informatiques utilisés pour la simulation et l'optimisation des structures de cellules solaires seront présentés.

II.1.1 Modèle dérive-diffusion

Il existe un certain nombre de modèles physiques utilisés pour décrire le transport des porteurs de charges (électrons et trous) dans les semi-conducteurs. Ces modèles sont basés généralement sur la résolution de l'équation de transport de Boltzmann. Cette équation décrit l'évolution de la fonction de distribution des porteurs de charges (f) qui dépend de la position dans l'espace r , du vecteur d'onde k et du temps t : $f(r, k, t)$ [75–77]. Cette équation s'écrit :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_r f + \frac{qE}{\hbar} \cdot \nabla_k f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{Collisions} \quad (II.1)$$

où f représente la fonction de distribution, une notation simplifiée pour $f(r, k, t)$. q est la charge électronique élémentaire. E est le champ électrique. $\hbar$ est la constante de Planck réduite. v représente la vitesse des porteurs.

- Le terme $\frac{\partial f}{\partial t}$: traduit la variation de la fonction de distribution dans le temps.
- Le terme $v \cdot \nabla_r f$: traduit l'influence des phénomènes de diffusion qui sont proportionnels aux gradients de concentration des porteurs.
- Le terme $\frac{qE}{\hbar} \cdot \nabla_k f$: traduit l'action des forces extérieures imposées aux particules comme le champ électrique.
- Le terme $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{Collisions}$: traduit les interactions et les collisions entre les porteurs de charges et les collisions des porteurs avec les impuretés et les défauts cristallins.

Dans le cas où le système est à l'équilibre thermique correspondant à la température T (aucune force n'est appliquée), la fonction de distribution est donnée par l'équation II.2. On dit que le système obéit à la statistique de Fermi-Dirac [75].

$$f(\epsilon) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\epsilon - E_F}{k_B T}\right)} \quad (\text{II.2})$$

où E_F est le niveau de fermi et k_B est la constante de Boltzmann. $f(\epsilon)$ représente la probabilité qu'un état électronique disponible d'énergie ϵ soit occupé par un électron.

Dans le cas où la différence $\epsilon - E_F$ est très supérieure à $k_B T$, l'équation (II.2) se simplifie en constatant que le terme en exponentiel est largement supérieur à 1. La fonction de distribution devient donc :

$$f(\epsilon) = \exp\left(\frac{E_F - \epsilon}{k_B T}\right) \quad (\text{II.3})$$

Ici, on dit que le système obéit à la statistique de Boltzmann [78, 79]. Ainsi, pour déterminer la répartition des porteurs de charges sur les niveaux d'énergie permis dans le matériau, on peut utiliser soit la statistique de Fermi-Dirac (équation II.2) soit la statistique de Boltzmann (équation II.3).

La statistique de Boltzmann s'applique dans le cas où la différence $\epsilon - E_F$ est sensiblement supérieure à $k_B T$. C'est typiquement dans le cas où le niveau de dopage est "faible" ou "moyen". Dans le cas de semi-conducteurs fortement dopés, la statistique Fermi-Dirac s'applique.

Trouver la solution de cette équation (Équation II.1) a toujours été un domaine de recherche particulièrement important de la physique des semi-conducteurs. Il existe prin-

cipalement deux approches pour résoudre cette équation : l'approche stochastique par le modèle Monte-Carlo [80] et l'approche déterministe par le modèle dérive-diffusion.

Dans ce travail de thèse, le logiciel de simulation utilisé pour la modélisation des structures de cellules solaires est basé sur le modèle dérive-diffusion et la statistique de Fermi-Dirac pour décrire la répartition des porteurs de charges dans le matériau. Ce modèle, comme son nom l'indique, tient compte de la dérive due au champ électrique appliqué au dispositif et du transport de charges causé par le gradient de concentration des porteurs dans la structure [81]. Il est largement utilisé dans le domaine de la recherche et du développement industriel pour la modélisation des dispositifs à base de semi-conducteurs. Nous allons voir ici, dans un premier temps, les équations fondamentales de ce modèle puis nous présenterons le simulateur utilisé, dans la dernière partie de ce chapitre.

Le modèle dérive-diffusion permet de résoudre une forme simplifiée de l'équation de Boltzmann. Les équations mises en jeu dans ce modèle sont les suivantes : l'équation de Poisson, les équations de continuité (ou équations de conservation du courant) et les équations de transport.

II.1.1.1 L'équation de poisson

L'équation de Poisson permet d'établir un rapport entre les variations du potentiel électrostatique ϕ et la densité volumique de charge électrique [22, 82] :

$$\text{div}(\epsilon \nabla \phi) = -\rho \quad (\text{II.4})$$

où ϵ désigne la permittivité absolue du matériau, qui peut être exprimée par le produit de sa permittivité relative multipliée par la permittivité du vide selon la formule [5] : $\epsilon = \epsilon_r \times \epsilon_0$. ρ est la densité volumique de charge, elle se calcule en tenant compte de toutes les charges qui existent en un point du semi-conducteur (électrons, trous, charges fixes, impuretés ionisées). Le champ électrique est obtenu à partir du potentiel électrique par la relation suivante [83] : $E = -\text{grad}\phi$

II.1.1.2 Les équations de continuité

Les équations de continuité décrivent les variations temporelles des densités de charge (électrons, trous), elles sont définies par les équations [22, 82] :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \text{div} \vec{J}_n + G_n - R_n \quad (\text{II.5})$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \text{div} \vec{J}_p + G_p - R_p \quad (\text{II.6})$$

Où n et p sont les concentrations des électrons et des trous, $\vec{J}_n$ et $\vec{J}_p$ sont les densités de courant d'électrons et de trous, G_n et G_p sont les taux de génération des électrons et des trous et R_n et R_p sont les taux de recombinaison des électrons et des trous, lesquelles ont eux mêmes des expressions complexes, liées notamment à l'éclairement.

II.1.1.3 Les équations de transport

Le déplacement des porteurs de charges se fait soit sous l'effet d'un champ électrique soit sous l'action d'un gradient de concentration de porteurs de charges. Sous l'action d'un champ électrique, on a un courant appelé courant de dérive (ou courant de conduction) proportionnel au champ électrique, défini par la relation suivante [22, 82] :

$$\vec{J}_n = n \cdot q \cdot \mu_n \vec{E} \quad (\text{II.7})$$

$$\vec{J}_p = p \cdot q \cdot \mu_p \vec{E} \quad (\text{II.8})$$

Où $\vec{E}$ est le champ électrique et μ_n et μ_p les mobilités respectivement des électrons et des trous.

Sous l'action d'un gradient (variation spatiale) de la densité des porteurs, le mouvement de ces derniers s'effectue des régions à forte concentration vers les régions à faible concentration. On a un courant qui porte le nom de courant de diffusion [22, 82] :

$$\vec{J}_n = q \cdot D_n \nabla n \quad (\text{II.9})$$

$$\vec{J}_p = -q \cdot D_p \nabla p \quad (\text{II.10})$$

Où D_n et D_p sont les constantes de diffusion des électrons et des trous. Elles sont définies par la relation d'Einstein [22, 82, 84] :

$$D_n = \frac{k_B T}{q} \mu_n \quad (\text{II.11})$$

$$D_p = \frac{k_B T}{q} \mu_p \quad (\text{II.12})$$

où k_B désigne la constante de Boltzmann et T la température.

En faisant la somme de ces deux types de courants (courant de dérive et diffusion), nous aboutissons à l'expression suivante de la densité de courant totale pour les électrons et les trous [22, 82] :

$$\vec{J}_n = n \cdot q \cdot \mu_n \vec{E} + q \cdot D_p \nabla p \quad (\text{II.13})$$

$$\vec{J}_p = p \cdot q \cdot \mu_p \vec{E} - q \cdot D_p \nabla p \quad (\text{II.14})$$

Ces équations sont résolues directement au sein du simulateur. Cependant, nous devons aussi spécifier les modèles physiques utilisés que nous présenterons dans la partie suivante. Certains de ces modèles sont directement renseignés dans le simulateur, d'autres sont programmés à part et intégrés ensuite dans le simulateur.

II.1.2 Les modélisations physiques

Dans la section précédente, nous avons présenté le modèle dérive-diffusion utilisé pour décrire la dynamique des porteurs de charges et les statistiques utilisées pour décrire leurs densités. Dans cette section, nous allons présenter les différents modèles physiques décrivant les comportements des porteurs de charges dans le matériau. Les modèles pour la mobilité de porteurs, celui du coefficient d'absorption et celui décrivant l'indice de réfraction sont programmé à part puis intégrés dans le simulateur. Les autres modèles tels que ceux permettant de définir les différents types de recombinaison sont directement renseignés dans le simulateur.

Paramètres	InN	GaN
$\mu_{1n}[cm^2/Vs]$	1982,9	295
$\mu_{1p}[cm^2/Vs]$	3,0	3,0
$\mu_{2n}[cm^2/Vs]$	10885	1460
$\mu_{2p}[cm^2/Vs]$	340	170
δ_n	0.7439	3,08
δ_p	2,0	2,0
$N_n^{crit}[cm^{-3}]$	$1,0 \times 10^{17}$	$7,7 \times 10^{16}$
$N_p^{crit}[cm^{-3}]$	$8,0 \times 10^{17}$	$1,0 \times 10^{18}$

TABLEAU II.1 – les paramètres utilisés dans les équations (II.15 et II.16) pour modéliser les mobilités des électrons et des trous [27, 86, 87]. En l'absence de données expérimentales, les valeurs des paramètres α , β et γ sont prises égale à 1.

II.1.2.1 Les modèles physiques utilisés

a) Les modèles de mobilité

La mobilité des porteurs de charges caractérise leur capacité à se déplacer efficacement dans le matériau. Elle dépend de nombreux paramètres tels que la température, le dopage, ou encore les collisions des porteurs entre eux ou avec les impuretés. Le modèle que nous utilisons est un modèle analytique et empirique proposé par Caughey et Thomas [85] dans lequel sont pris en compte à la fois le champ électrique et la température. La mobilité des électrons μ_n et celle des trous μ_p sont données par les relations suivantes :

$$\mu_n = \mu_{1n} \left(\frac{T}{300} \right)^{\alpha_n} + \frac{\mu_{2n} \left(\frac{T}{300} \right)^{\beta_n} - \mu_{1n} \left(\frac{T}{300} \right)^{\alpha_n}}{1 + \left(\frac{N}{N_n^{crit} \left(\frac{T}{300} \right)^{\gamma_n}} \right)^{\delta_n}} \quad (II.15)$$

$$\mu_p = \mu_{1p} \left(\frac{T}{300} \right)^{\alpha_p} + \frac{\mu_{2p} \left(\frac{T}{300} \right)^{\beta_p} - \mu_{1p} \left(\frac{T}{300} \right)^{\alpha_p}}{1 + \left(\frac{N}{N_p^{crit} \left(\frac{T}{300} \right)^{\gamma_p}} \right)^{\delta_p}} \quad (II.16)$$

où N est la concentration totale du dopage, T la température, α , β , γ , δ , μ_2 , μ_1 et N^{crit} sont des paramètres empiriques. Leurs valeurs sont rapportées dans le tableau II.1.

Les paramètres d'InGaN, lorsqu'ils ne sont pas disponibles expérimentalement, sont estimés à partir d'une interpolation linéaire (loi de Vegard) entre les valeurs expérimentales de InN et de GaN.

Composition d'indium	C	D
1	0.69642	0.46055
0.83	0.66796	0.68886
0.69	0.58108	0.66902
0.57	0.60946	0.62182
0.5	0.51672	0.46836
0	3.52517	-0.65710

TABLEAU II.2 – Valeurs de C et D de l'équation (II.17) rapportées par Brown et. al. dans [27].

b) Le coefficient d'absorption

Le coefficient d'absorption est un paramètre qui influence directement la densité de courant délivrée par la cellule et donc son rendement. Pour décrire l'absorption dans In-GaN, nous utilisons un modèle empirique défini par la relation suivante :

$$\alpha^{(cm^{-1})} = 10^5 \sqrt{C (E_{ph} - E_g) + D (E_{ph} - E_g)^2} \quad (II.17)$$

où E_{ph} est l'énergie du photon incident et E_g est l'énergie de la bande interdite pour une composition d'indium donnée. Les valeurs de C et D, sont obtenues à partir des mesures expérimentales rapportées dans [27] et résumées dans le tableau II.2. Leur dépendance à la composition d'indium x est approchée par un ajustement polynomial de degré 4 pour C et quadratique pour D :

$$\begin{aligned} C &= 3.525 - 18.29x + 40.22x^2 - 37.52x^3 + 12.77x^4 \\ D &= -0.6651 + 3.616x - 2.460x^2 \end{aligned}$$

c) L'indice de réfraction

L'indice de réfraction est calculé en utilisant le modèle d'Adachi donné par l'expression suivante [88] :

$$n(E_{ph}) = \sqrt{\frac{A}{\left(\frac{E_{ph}}{E_g}\right)^2} \left[2 - \sqrt{1 + \frac{E_{ph}}{E_g}} - \sqrt{1 - \frac{E_{ph}}{E_g}} \right] + B} \quad (\text{II.18})$$

où E_g est la largeur de la bande interdite, E_{ph} est l'énergie du photon incident. A et B sont des paramètres empiriques dépendant de la composition d'indium dans le matériau. Pour InN, nous avons : $A^{\text{InN}} = 13,55$ et $B^{\text{InN}} = 2,05$. Pour GaN, nous avons : $A^{\text{GaN}} = 9,31$ et $B^{\text{GaN}} = 3,03$. Les valeurs de InGaN sont obtenues à partir d'une interpolation linéaire entre les valeurs de InN et de GaN [86] :

$$A^{\text{InGaN}} = 13,55x + 9,31(1 - x) \quad (\text{II.19})$$

$$B^{\text{InGaN}} = 2,05x + 3,03(1 - x) \quad (\text{II.20})$$

d) Les modèles de génération et recombinaison des porteurs

Pour la modélisation des pertes dans la structure, nous prenons en compte les recombinaisons Shockley-Read-Hall (SRH) [89]. Dans ce modèle, les recombinaisons se font par l'intermédiaire des défauts dont le niveau d'énergie se situe dans la bande d'énergie interdite. Elles sont définies par l'expression suivante [30, 90] :

$$R_{\text{SRH}} = \frac{np - n_i^2}{\tau_p \left[n + n_i \exp\left(\frac{E_{\text{trap}}}{k_B T}\right) \right] + \tau_n \left[p + n_i \exp\left(\frac{-E_{\text{trap}}}{k_B T}\right) \right]} \quad (\text{II.21})$$

où n et p sont respectivement, les concentrations d'électrons et des trous. n_i est la concentration des porteurs intrinsèques. E_{trap} est la différence d'énergie entre la position énergétique du défaut et le niveau de Fermi intrinsèque. k la constante de Boltzmann et enfin T la température. τ_n et τ_p sont les durées de vie des électrons et des trous définis en fonction des concentrations des dopants [90, 91] :

$$\tau_n = \frac{\tau_n^0}{1 + \left(\frac{N_{\text{total}}}{N_{\text{SRH}}^n}\right)} \quad (\text{II.22})$$

$$\tau_p = \frac{\tau_p^0}{1 + \left(\frac{N_{\text{total}}}{N_{\text{SRH}}^p}\right)} \quad (\text{II.23})$$

où τ_n^0 et τ_p^0 sont les durées de vie de référence des porteurs (électrons et trous) in-

dépendants de la densité de défauts. N_{total} est la concentration totale des impuretés de dopage et de défauts. N_n^{SRH} et N_p^{SRH} sont des constantes définissant les concentrations de défauts recombinaisons pour les électrons et les trous, respectivement. Leurs valeurs sont rapportées dans le tableau II.3.

Nous intégrons aussi dans les simulations numériques les phénomènes de recombinaisons radiatives. En effet, ce type de recombinaison est fréquent dans les semi-conducteurs à gap direct [31]. Il est défini par l'expression suivante [30, 90] :

$$R_{rad} = \beta(np - n_i^2) \quad (II.24)$$

Où β désigne le coefficient de recombinaison radiative.

Bien que moins fréquents par rapport aux autres, les phénomènes de recombinaison Auger sont eux aussi pris en compte. Sur la figure II.1, nous avons présenté la variation de ces trois phénomènes de recombinaison dans une cellule solaire PN à base d'InGaN sous éclairage AM1.5. On peut voir que ce sont les recombinaisons radiatives qui sont majoritaires suivies des recombinaisons SRH. Le type de recombinaison Auger est minoritaire dans InGaN. Il est défini par la relation suivante [30, 90, 92] :

$$R_{Auger} = C_n(pn^2 - nn_i^2) + C_p(np^2 - pn_i^2) \quad (II.25)$$

Où C_n et C_p sont des coefficients de recombinaison Auger. Leurs valeurs pour InN et GaN sont données dans le tableau II.3. Les mécanismes de tous ces types de recombinaison définis ici, sont expliqués dans la partie I.2.2.2 page 26 du chapitre I.

II.1.2.2 Les propriétés électriques d'InGaN

En raison d'un manque de données expérimentales, les propriétés électriques de InGaN sont-elles aussi déduites à partir d'une interpolation linéaire (loi de Vegard) entre les valeurs de InN et GaN excepté pour la bande d'énergie interdite (E_g) et l'affinité électronique (χ). Ces dernières sont obtenues à partir d'une loi de Vegard avec un paramètre de courbure, b , (loi de Vegard modifiée). Pour E_g , b est pris égal à 1,43 eV [28, 29] et pour χ , b est pris égal à 0,8 eV [96].

L'affinité électronique est donc donnée par :

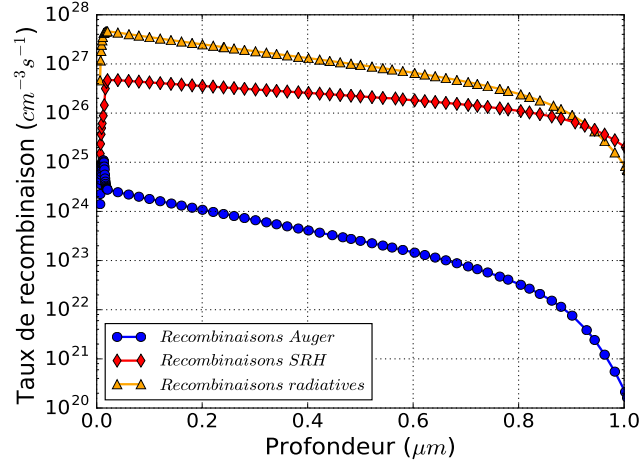


FIGURE II.1 – Variations des différents taux de recombinaison à travers une structure PN à base d'InGaN sous éclaircment AM1.5.

Paramètres	InN	GaN
$\tau_n^0 [s]$	$1,0 \times 10^{-9}$	$1,0 \times 10^{-9}$
$\tau_p^0 [s]$	$1,0 \times 10^{-9}$	$1,0 \times 10^{-9}$
$N_n^{SRH} [cm^{-3}]$	$5,0 \times 10^{16}$	$5,0 \times 10^{16}$
$N_p^{SRH} [cm^{-3}]$	$5,0 \times 10^{16}$	$5,0 \times 10^{16}$
$\beta [cm^3/s]$	$2,0 \times 10^{-10}$	$1,1 \times 10^{-8}$
$C_n [cm^6/s]$	$1,5 \times 10^{-30}$	$1,0 \times 10^{-30}$
$C_p [cm^6/s]$	$1,5 \times 10^{-30}$	$1,0 \times 10^{-31}$

TABEAU II.3 – Valeurs des paramètres de différents phénomènes de recombinaison pour InN et GaN. Les valeurs correspondantes à InGaN sont obtenues par une interpolation linéaire (loi de Vegard) entre les valeurs de InN et GaN [93–95].

Croissance	Gap InN (eV)	x	Couche InGaN	b (eV)
MBE	0,77	$0,0 < x < 0,5$	Relaxée	1,43 [97]
MOVPE	0,675	$0,15 < x < 0,19$	Relaxée	1,65 [98]
MBE	0,64 à 0,77	$0,0 < x < 0,25$	Relaxée	2,87 [99]
	0,74 à 0,87		Contrainte	1,32 [99]
MOVPE	0,799	$0,0 < x < 1,0$	N.R.	2,8 [100]

TABLEAU II.4 – Différentes valeurs des paramètres de courbure (b) reportées dans la littérature. x représente la composition d'indium dans $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$. MOCVD : épitaxie en phase vapeur aux organométalliques, MBE : épitaxie par jets moléculaires, N.R. : Non Renseigné.

$$\chi^{\text{InGaN}} = x.\chi^{\text{InN}} + (1-x)\chi^{\text{GaN}} - 0,8x(1-x) \quad (\text{II.26})$$

et la bande d'énergie interdite par :

$$E_g^{\text{InGaN}} = x.E_g^{\text{InN}} + (1-x)E_g^{\text{GaN}} - 1,43x(1-x) \quad (\text{II.27})$$

où χ^{InGaN} est l'affinité électronique d'InGaN. χ^{InN} et χ^{GaN} sont les affinités électroniques de InN et GaN, respectivement. E_g^{InGaN} est la bande d'énergie interdite de InGaN. E_g^{InN} et E_g^{GaN} sont les bandes d'énergie interdites de InN et GaN, respectivement. x est la concentration d'indium dans $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$. Nous avons rassemblé dans le tableau II.5 les propriétés électriques de InN et de GaN. Nous pouvons noter pour le paramètre de courbure de la bande d'énergie interdite, une disparité des valeurs reportées dans la littérature. Plusieurs facteurs peuvent expliquer cette disparité : la valeur théorique du gap de InN considérée, la méthode de mesure du gap de InGaN, l'état de contrainte de la couche InGaN ou encore la très grande incertitude lorsqu'il est estimé avec uniquement des points à faible x (composition d'indium), ce qui est souvent le cas. (voir tableau II.4).

	InN	GaN
Bande d'énergie interdite (E_g) [eV]	0,7	3,42
Affinité électronique (χ) [eV]	5,6	4,1
Densité d'états effectives de la bande de conduction (N_c) (cm^{-3})	$9,1 \times 10^{17}$	$2,3 \times 10^{18}$
Densité d'états effective de la bande de valence (N_v) (cm^{-3})	$5,3 \times 10^{19}$	$4,6 \times 10^{19}$
Masse effective des électrons, m_e	$0,11m_0$	$0,20m_0$
Masse effective des trous, m_h	$0,65m_0$	$0,80m_0$
Permittivité électrique (ϵ)	15,3	8,9

TABLEAU II.5 – Quelques valeurs des propriétés électriques du GaN et de InN à 300 K [28, 101, 102].

II.2 La méthodologie d'optimisation

II.2.1 Les différentes méthodes d'optimisation

L'objectif de la simulation numérique dans ce travail doctoral, est l'optimisation des cellules solaires. Optimiser un dispositif consiste à identifier une configuration optimale, ou un optimum de fonctionnement de ce dispositif. Dans notre cas, il s'agit de déterminer les performances optimales de différentes cellules et de mettre en évidence les paramètres qui impactent le plus fortement ces performances. Notre démarche de modélisation consiste en trois étapes :

- 1) Identifier les variables d'optimisation, c'est-à-dire les paramètres de la cellule solaire sur lesquels il est possible d'agir afin d'améliorer ces performances.
- 2) Trouver les méthodes d'optimisation adaptées à notre problème.
- 3) Décrire les contraintes précisant les valeurs que les paramètres d'optimisation peuvent prendre.

On distingue différents types et approches d'optimisation : l'optimisation paramétrique, la méthode de force brute et l'optimisation avec des méthodes mathématiques plus sophistiquées, que nous avons utilisées.

II.2.1.1 L'optimisation paramétrique

L'optimisation paramétrique est la plus couramment utilisée pour optimiser les cellules solaires. Elle consiste à faire varier l'un des paramètres physico-géométriques à la fois et à observer son influence sur les performances du dispositif.

Elle permet donc surtout de mettre en évidence l'influence d'un paramètre donné que l'on veut optimiser pour maximiser les performances d'un dispositif. Dans le cas de l'optimisation du rendement d'une cellule solaire, elle permettrait, par exemple, de connaître l'influence des paramètres physiques et géométriques de la cellule, permettant ainsi de connaître la valeur optimale du rendement en fonction de chaque paramètre et sa sensibilité par rapport à ces différents paramètres. L'intérêt de ce type d'optimisation réside dans le fait que l'influence de chaque paramètre sur le rendement de la cellule est facilement visualisable et ainsi permet de classer ces paramètres selon leur degré d'influence.

Pour un ensemble de paramètres donné de la cellule solaire, la valeur optimale du rendement est obtenue en ne variant à la fois qu'un seul paramètre de la cellule. Zhang et al. [103] ont simulé et optimisé une cellule solaire PN à base d'InGa_N, en optimisant les épaisseurs et les dopages de différentes couches. Ils ont d'abord optimisé les dopages en fixant de manière arbitraire les épaisseurs. Ensuite, à partir des valeurs optimales des dopages, ils ont optimisé les épaisseurs. Cependant, par rapport au rendement de la cellule, le dopage optimal d'une couche dépend étroitement de son épaisseur. Donc, ici, la démarche ne permet pas de trouver leurs optimums en les optimisant séparément. Le résultat obtenu par ces auteurs est donc aléatoire, dépendant du fait du choix initial des valeurs arbitraires des épaisseurs.

Doolittle et al. [66] ont, quant à eux, optimisé le rendement d'une structure PIN à base d'InGa_N, en optimisant, pour la couche I, son épaisseur et sa concentration d'indium séparément. Dans cette étude, ils ont également montré que la tension de circuit ouvert (V_{CO}) de la cellule dépend de l'épaisseur de la couche I et de la concentration d'indium. Par conséquent, ces deux paramètres sont interdépendants. On peut donc avancer que le fait d'optimiser ces deux paramètres séparément ne permet pas de trouver leur optimum à l'égard du rendement de la cellule.

Nous voyons donc de manière évidente, que pour réaliser une optimisation paramétrique, il est nécessaire que les valeurs des paramètres d'optimisation évoluent de ma-

nière indépendante les unes des autres. Pour une structure de cellule solaire, presque tous les paramètres (physiques et géométriques) sont interdépendants. De ce fait, optimiser le rendement, en ne faisant varier qu'un seul paramètre à la fois n'est donc physiquement pas justifié et entraînerait ainsi une forte incertitude dans l'estimation du rendement optimal. En effet, l'optimisation d'un paramètre va probablement modifier la valeur du rendement projetée sur les autres paramètres, et donc fausser l'optimum calculé auparavant.

L'optimisation paramétrique est malheureusement l'approche quasiment uniquement utilisée pour optimiser le rendement des structures de cellule solaire. Nous venons cependant de voir qu'elle ne permet pas d'accéder au rendement optimal de la cellule solaire.

II.2.1.2 La méthode de la force brute

La méthode de la force brute est basée sur une optimisation globale qui consiste à tester, une à une, toutes les combinaisons possibles des paramètres d'optimisation selon un pas d'échantillonnage donné. Ensuite, on va choisir parmi toutes ces combinaisons celle donnant le meilleur rendement de la cellule. Le nombre de solutions possibles et le temps de calcul requis augmentent donc exponentiellement avec le nombre de paramètres d'optimisation.

Supposons que l'on veuille optimiser le rendement d'une cellule solaire en optimisant juste 4 paramètres de la cellule. Si chaque paramètre varie 10 fois dans un intervalle donné, le nombre de calculs qui sera effectué sera égal à 10^4 . Dans notre cas, une seule simulation d'une structure de cellule solaire simple peut prendre environ 5 minutes sur l'un des serveurs de calcul utilisés durant ce travail, ce qui représente environ 1 mois de simulation. Pour l'optimisation de 5 paramètres, il faudrait environ 10 mois. C'est donc une méthode qui donne plus de chance de trouver le rendement optimal et simple à mettre en œuvre, mais qui nécessite un temps de calcul prohibitif à mesure que le nombre de paramètres augmente.

Le choix qui a été fait au cours de cette thèse, est de mettre en place une stratégie dédiée à l'optimisation de structures de cellules solaires avec des temps de calcul raisonnables et en tenant compte de l'interdépendance des paramètres d'optimisation. C'est une nouvelle approche pour l'optimisation des cellules solaires qui permet d'explorer efficacement et intelligemment le jeu de paramètres d'optimisation, même dans le cas d'un

grand nombre de paramètres, afin de mettre en évidence plus rapidement la solution optimale recherchée. Il s'agit d'une nouvelle approche dans la communauté des cellules solaires. Cependant, elle est au contraire bien connue dans d'autres communautés, comme celle du Machine Learning par exemple.

II.2.2 Notre approche : l'optimisation multivariée

Notre approche pour optimiser les structures de cellules solaires est basée sur une optimisation multivariée. Cela consiste à chercher les extrema (les minima et les maxima) d'une fonction objectif en fonction de plusieurs variables de la fonction selon une méthode mathématique rigoureuse. Dans notre cas, la fonction objectif est le rendement de conversion de la cellule solaire. Il s'agit donc ici, d'optimiser le rendement de la cellule en fonction de plusieurs paramètres physiques et géométriques de la cellule. Nous avons ainsi choisi des paramètres sur lesquels il est possible d'agir afin d'améliorer le rendement de la cellule tels que les épaisseurs et les dopages de différentes couches de la cellule.

Pour parvenir à cet objectif, nous avons conçu un programme d'optimisation en recourant à l'emploi d'algorithmes mathématiques d'optimisation rigoureuse développés par la communauté scientifique, existant dans la littérature et librement utilisables. Il existe en effet de nombreuses bibliothèques de programmes d'optimisation incluses au sein de différents logiciels de calcul comme *MatLab*, *Mathematica*, ou *SciPy*. C'est ce dernier que nous utilisons dans ce travail de thèse. Il est libre et gratuit et contient plusieurs modules pour l'optimisation. Nous allons donc voir dans cette partie, les différentes méthodes d'optimisation que l'on peut y trouver et le choix des méthodes utilisées pour ce travail.

II.2.2.1 Les méthodes mathématiques d'optimisation

Les méthodes d'optimisation peuvent être classées en deux catégories : celles avec des algorithmes d'optimisation qui permettent de résoudre des problèmes avec contraintes et celles avec des algorithmes de résolution des problèmes d'optimisations sans contrainte. Sachant que maximiser une fonction objectif (f) revient à la minimisation de $1-f$, tous les algorithmes qui sont présentés ici ont pour objectif de rechercher les minima de la fonction objectif de n variables $x_1, \dots, x_n$. Soit le problème d'optimisation suivant [104] :

$$\min_{x_1, \dots, x_n} f(x_1, \dots, x_n)$$

Résoudre ce problème revient à chercher le point $(x_1^*, \dots, x_n^*) \in \mathbb{R}^n$ vérifiant :

$$\min_{x_1, \dots, x_n} f(x_1, \dots, x_n) = f(x_1^*, \dots, x_n^*)$$

Le point $(x_1^*, \dots, x_n^*)$ représente le minimum local de la fonction. En effet, toutes les méthodes de minimisation que nous allons voir ici ne permettent de trouver que des minima locaux de $f(x_1, \dots, x_n)$, contrairement aux méthodes dites globales qui permettent donc de trouver les minima absolus de la fonction objectif [104]. Ces méthodes de minimisation sont des méthodes dites de "descente" qui, pour un point donné de l'algorithme $(x_1^k, \dots, x_n^k)$ à l'étape k , font en sorte qu'à l'étape $(k + 1)$ le point $(x_1^{k+1}, \dots, x_n^{k+1})$ donne une valeur plus petite à la fonction f , soit [104, 105] :

$$f(x_1^{k+1}, \dots, x_n^{k+1}) \leq f(x_1^k, \dots, x_n^k)$$

Il s'agit d'algorithmes itératifs qui, à partir de paramètres initiaux choisis dans l'espace de recherche, cherchent itérativement à améliorer le critère de la fonction objectif.

II.2.2.1.1 L'optimisation sans contraintes

On distingue plusieurs méthodes numériques pour résoudre les problèmes d'optimisation sans contraintes implémentées dans la bibliothèque de programmes d'optimisation de *Scipy* [106].

La méthode du **gradient conjugué (CG)** : cette méthode est basée sur un algorithme de gradient conjugué non linéaire proposé par Polak-Ribiere [107] qui est une variante de la méthode Fletcher-Reeves décrite dans [108]. L'algorithme utilise la direction de recherche successives d_k dite *direction conjuguée*, pour minimiser la fonction objectif f . Suite à une recherche de minimum dans une direction donnée, la direction conjuguée correspond à une recherche orthogonale à la direction initiale à partir du minimum trouvé. Dans le cas de l'algorithme de Polak-Ribiere, la direction de recherche successive à l'étape k est donnée par [105, 109] :

$$d_k = \nabla f(x_k) + \frac{\|\nabla f(x_k)\|^2}{\|\nabla f(x_{k-1})\|^2} d_{k-1}$$

L'algorithme de Polak-Ribiere reprend le principe de l'algorithme de Fletcher-Reeves en modifiant simplement la formule définissant la direction de recherche successive par :

$$d_k = \nabla f(x_k) + \frac{(\nabla f(x_k) - \nabla f(x_{k-1}))^T \nabla f(x_k)}{\|\nabla f(x_{k-1})\|^2}$$

La méthode CG repose surtout sur la résolution des problèmes quadratiques. Cependant, rien n'interdit de l'utiliser pour les problèmes non linéaires [105, 109].

La méthode de **Newton** : L'idée principale de cette méthode consiste à simplifier le problème, c'est-à-dire remplacer un problème difficile par un autre plus simple. Par exemple, comme une équation non linéaire est difficile à résoudre, on va la remplacer par une équation linéaire [109]. C'est une méthode qui fonctionne très bien lorsque le calcul de la hessienne de f ($\nabla^2 f(x_k)$) est facile. Cependant, à chaque itération, il faut calculer explicitement la matrice hessienne. La direction de recherche successive d_k appelée *direction de Newton* est donnée par la formule suivante [105, 109] :

$$d_k = -\nabla^2 f(x_k)^{-1} \nabla f(x_k)$$

Le point faible de la méthode est donc le fait que chaque itération nécessite le calcul de la matrice hessienne, une information qui n'est toujours pas disponible en pratique. Différentes méthodes ont été donc développées pour l'améliorer, notamment les méthodes dites quasi-Newton et les méthodes de Newton tronquées.

La méthode **BFGS** : c'est une méthode mise au point par Broyden, Fletcher, Goldfarb et Shanno (BFGS) [110] dite quasi-Newton car elle se base sur le raisonnement de la méthode Newton [111]. Comme toutes les méthodes quasi-newton, le principe est d'éviter le calcul de la matrice hessienne qui est parfois problématique à trouver et de calculer à la place une approximation de cette dernière qui dépend tout simplement du gradient de la fonction. La méthode **BFGS** propose donc de remplacer la hessienne de f ($\nabla^2 f(x_k)$) par une matrice H_k définie par [109]

$$H_k d_k = -\nabla f(x_k)$$

La direction de recherche successive appelée direction de quasi-Newton, est donc donnée par l'équation suivante, équivalente à l'équation de Newton [109] :

$$d_k = -H_k^{-1} \nabla f(x_k)$$

La méthode de **Nelder-Mead** : c'est une méthode d'optimisation basée sur l'algorithme de John Nelder et Mead publiée en 1965. C'est une méthode numérique rapide ne nécessitant pas de calcul de gradient de la fonction objectif, mais elle peut bien sûr être utilisée sur des fonctions différentiables [112]. Cette méthode appelée également méthode du simplex exploite le concept de simplexe¹. La méthode consiste à effectuer un essai à chaque sommet du simplex (n dimension). Les points sont triés de tel sorte que

$$f(x_1) \leq f(x_2) \leq \dots \leq f(x_{n+1}).$$

Le plus mauvais des ces points (x_{n+1}) est ensuite éliminé et remplacé par un point meilleur situé dans une autre direction (d). Cette dernière est déterminée en calculant le centre de gravité x_c du simplex formé par les autres points, elle est donnée par [109] :

$$d = x_c + x_{n+1}.$$

L'opération peut se faire à pas fixe ou à pas variable, ce qui conduit plus généralement à la valeur optimale [113].

La méthode de **Powell** : c'est une méthode qui réalise des minimisations unidimensionnelles suivant des directions conjuguées sans calculer le gradient de la fonction [114]. C'est également une méthode quasi-Newton, l'idée est donc d'imiter l'algorithme de Newton tout en évitant de calculer la hessienne de la fonction objectif.

La méthode **Newton-CG** : cette méthode est un couplage entre les méthodes itératives de Newton et du gradient conjugué (CG) [115]. Elle est également appelée méthode de Newton tronqué et utilise la méthode CG pour déterminer la direction de recherche successive.

1. Figure géométrique à n dimensions

II.2.2.1.2 L'optimisation sous contraintes

Une des limites des méthodes sans contraintes que l'on vient de voir, tient à la notion de paramètre borné. En effet, il arrive très souvent que certains paramètres d'optimisation ne soient valides que dans un certain intervalle. Par exemple, dans notre cas, les épaisseurs de couches de la cellule ne peuvent pas être négatives. Introduire des contraintes dans un problème d'optimisation permet donc d'interdire les valeurs non-réalistes des variables d'optimisation. Le problème peut avoir des contraintes d'égalité, soit le problème

$$\min_{(x_1, \dots, x_n)=0} f(x_1, \dots, x_n)$$

ou des contraintes de bornes inférieures et supérieures, soit le problème d'optimisation suivant :

$$\min_{l_i \leq (x_1, \dots, x_n) \leq u_i} f(x_1, \dots, x_n)$$

où $l_i \neq u_i$, pour tout $i = 1, \dots, n$ [109]. On distingue également plusieurs algorithmes d'optimisation sous contraintes [106].

La méthode **L-BFGS-B** (Low-storage Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno Bound-constrained) : c'est une méthode faisant partie de la famille des méthodes quasi-newton très proche de la méthode BFGS. En effet, c'est une extension de cette dernière permettant de résoudre les problèmes avec contraintes avec une quantité limitée de mémoire d'ordinateur. Elle est destinée à des problèmes de grande taille dans lesquels les informations sur la matrice hessienne sont difficiles à obtenir [116].

La méthode **COBYLA** (Constrained Optimization BY Linear Approximation) : c'est une méthode basée sur des approximations linéaires successives de la fonction objectif, ne requérant donc pas la dérivée de cette dernière. Elle est décrite par Michael JD Powell dans [117]. Les approximations linéaires sont réalisées au moyen d'un simplexe (n dimensions) de n+1 points dans une région de confiance à chaque itération.

La méthode **TNC** (Truncated Newton with Constraints) : elle utilise l'algorithme de Newton tronqué avec des contraintes. Il s'agit d'un algorithme à convergence quadra-

tique, qui permet aussi de se passer du calcul de la dérivée de la fonction objectif [118]. Elle est très similaire à la méthode Newton-CG et se diffère de ce dernier par le fait que chaque paramètres d'optimisation peut être contraint sur un intervalle [106].

La méthode **SLSQP** (Sequential Least Squares Programming) : il s'agit d'un algorithme séquentiel des moindres carrés utilisant aussi la méthode quasi-newton et une variante de la méthode BFGS. C'est une version mise à jour du programme d'optimisation non-linéaire SLSQP réalisé par Dieter Kraft [119].

II.2.2.2 Le choix des méthodes

Les méthodes d'optimisation présentées précédemment ne donnent qu'un bref aperçu des très nombreuses méthodes que l'on peut trouver dans la littérature. Le choix d'une méthode adaptée à la problématique traitée est généralement très difficile. Car si on a vu qu'il existe plusieurs méthodes d'optimisation, il n'existe pas de méthodes d'optimisation parfaite pour tous les types des problèmes d'optimisation. En effet, aucun algorithme ne peut logiquement prétendre être meilleur que les autres en termes de performances sur tous les types de problèmes. Il faut donc chercher en fonction du problème, la méthode la mieux adaptée. Ce choix va bien évidemment être conditionné par les propriétés et la nature de la fonction objectif : convexité, linéarité, ou encore l'existence ou non de contraintes.

Dans ce travail de thèse, nous nous intéressons à l'optimisation des rendements de conversion de différentes structures de cellules solaires. L'objectif est de réaliser une optimisation assurant de trouver le rendement optimal de la cellule. L'approche consiste à faire simultanément varier plusieurs paramètres physiques et géométriques de la cellule solaire afin de trouver le jeu de paramètres donnant le meilleur rendement de conversion de la cellule.

Pour mener à bien ce problème, nous avons réalisé plusieurs tests de différentes méthodes d'optimisations présentées ci-dessous, en optimisant le rendement en fonction de quatre paramètres (les dopages et les épaisseurs de la couche P et N) d'une structure de cellule solaire à jonction PN. Pour pouvoir comparer les différentes méthodes, nous avons considéré pour chaque test, les mêmes intervalles d'optimisation et les mêmes paramètres initiaux (voir tableau II.6). L'évaluation a principalement porté sur trois critères :

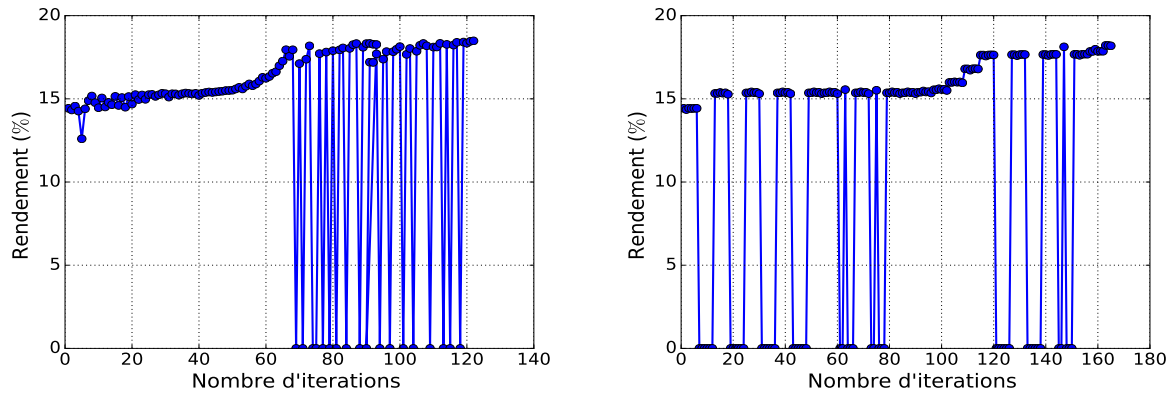
Paramètres d'optimisation	$N_a(cm^{-3})$	$d_p(\mu m)$	$N_d(cm^{-3})$	$d_n(\mu m)$
Intervalles d'optimisation	$[10^{16} - 10^{19}]$	$[0,01 - 0,10]$	$[10^{16} - 10^{19}]$	$[0,1 - 1,0]$
Paramètres initiaux	$1,0 \cdot 10^{17}$	0,05	$1 \cdot 10^{17}$	0,50

TABLEAU II.6 – Paramètres et intervalles d'optimisation, ainsi que les paramètres initiaux pour l'optimisation d'une structure de cellule solaire PN. N_a et d_p désignent respectivement le dopage et l'épaisseur de la couche P et N_d et d_n désignent, respectivement, le dopage et l'épaisseur de la couche N.

la convergence de l'algorithme, le respect des intervalles d'optimisation et le temps de calcul nécessaire à l'obtention du rendement optimal.

Toutes les méthodes mettent environ 5 à 10 minutes pour une simulation. En effet, la durée d'une simulation dépend surtout du programme de simulation qui est identique pour toutes les méthodes. En revanche, le temps de convergence dépend de la méthode d'optimisation utilisée. Ceci va dépendre essentiellement de deux facteurs ; la durée des simulations et le nombre d'itérations nécessaire à l'optimisation du rendement. Bien entendu, nous avons intérêt à ce que ce temps de convergence soit le plus faible possible afin de trouver l'optimum du rendement en un minimum d'itérations. Nous avons regroupé sur la tableau II.7 les temps de convergence de quelques méthodes.

À partir de ces tests, nous nous sommes vite rendu compte que les méthodes d'optimisation sans contraintes sont assez lentes et donnent la plupart du temps des paramètres optimaux hors des intervalles d'optimisation, ce qui peut conduire à des paramètres physiques et géométriques irréalisables. La figure II.2 présente les profils d'optimisation du rendement avec les méthodes BGFS et Nelder-Mead (optimisation sans contraintes) en fonction du nombre d'itérations. L'optimisation avec la méthode BFGS a nécessité environ 30 heures de simulation pour 165 itérations. Celle avec la méthode Nelder-Mead a nécessité environ 18 heures de simulation pour 122 itérations. Nous avons regroupé sur le tableau II.7 les nombres d'itérations et les temps de convergence de ces deux méthodes. Les rendements optimaux obtenus avec ces deux méthodes présentent au moins un paramètre optimal se trouvant hors intervalle d'optimisation. Pour la méthode BFGS l'épaisseur optimale de la couche N est de $1,3 \mu m$ alors que nous avons fixé la limite supérieure de l'intervalle d'optimisation à $1,0 \mu m$. Pour la méthode Nelder-Mead les dopages optimaux de la couche N et P sont respectivement de $8,4 \cdot 10^{15} cm^{-3}$ et $1,4 \cdot 10^{20} cm^{-3}$, des



(a) Optimisation du rendement avec la méthode Nelder-Mead en fonction du nombre d'itérations.

(b) Optimisation du rendement avec la méthode BGFS en fonction du nombre d'itérations.

FIGURE II.2 – Profils d'optimisation du rendement de la cellule solaire PN avec des méthodes d'optimisation sans contraintes. Les rendements à 0% correspondent à des valeurs physiques irréalisables comme des épaisseurs de couches négatives.

valeurs qui dépassent également les limites des intervalles d'optimisation respectifs. On remarque également tout au long de l'optimisation, des rendements nuls qui sont obtenus avec des épaisseurs de couches négatives hors intervalles d'optimisation.

Les méthodes d'optimisation sans contraintes ne permettent donc pas de respecter les limites physiques et géométriques de la cellule solaire. Par conséquent, l'espace de recherche de l'optimum devient très vaste, c'est pourquoi les méthodes mettent beaucoup plus de temps à trouver l'optimum.

Concernant les méthodes d'optimisation sous contraintes testées, à savoir COBYLA, L-BFGS-B, TNC et SLSQP, seule la méthode COBYLA ne permet pas de parvenir à un résultat satisfaisant. En effet, comme pour les méthodes sans contraintes, certains paramètres optimaux obtenus présentent des valeurs qui sont hors intervalles d'optimisation. Ceci est dû au fait que, contrairement aux trois autres méthodes (L-BFGS-B, TNC et SLSQP), la méthode COBYLA n'est pas une méthode bornée. C'est-à-dire que la méthode ne tient pas compte des contraintes de bornes (min, max) imposées par le problème. Sur la figure II.3, nous avons présenté les profils de d'optimisation du rendement de la cellule PN avec les méthodes SLSQP, L-BFGS-B et TNC. Ces trois méthodes respectent bien les contraintes (intervalles d'optimisation) et obtiennent le même rendement optimal avec presque les mêmes paramètres optimaux. Nous avons regroupé sur le tableau II.7 les nombres d'itérations et les temps de convergence de ces différentes méthodes.

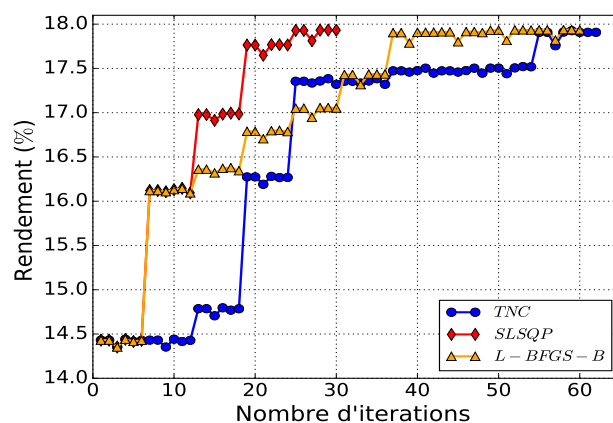


FIGURE II.3 – Profils d'optimisation du rendement de la cellule solaire PN avec des méthodes d'optimisation sous contraintes.

Méthodes d'optimisation	Optimisation sans contraintes		Optimisation sous contraintes		
	BFGS	Nelder-Mead	SLSQP	L-BFGS-B	TNC
Nombre d'itération	165	122	30	60	62
Temps de convergence (h)	30	18	4	9	7

TABLEAU II.7 – Nombre d'itérations et temps de convergence estimé pour l'optimisation du rendement d'une structure de cellule solaire à jonction PN. Optimisation du rendement en fonction de quatre paramètres de la cellule avec différentes méthodes d'optimisation.

La méthode SLSQP est la plus rapide comme le montre la figure II.3, avec un temps de convergence d'environ 4 heures pour 30 itérations. C'est aussi celle qui converge le mieux, pour n'importe quel jeu de paramètres initiaux, comme on le voit sur la figure II.4. Nous avons sur cette figure, présenté deux profils d'optimisation avec deux conjectures initiales différentes : un point avec un rendement initial de 14,43 % et un autre avec un rendement initial de 9,24 %, et on peut voir que les deux profils convergent vers un même optimum.

La méthode L-BFGS-B présente également des résultats de convergence satisfaisants avec un temps de convergence d'environ 9 heures nécessitant 60 itérations.

La méthode TNC présente un temps de convergence d'environ 7 heures nécessitant 62 itérations. La méthode est donc plus rapide par rapport à la méthode L-BFGS-B même si elle nécessite plus d'itérations. Cela montre donc que les simulations durent moins de temps avec la méthode TNC qu'avec la méthode L-BFGS-B. Cependant, la méthode TNC diverge très souvent par rapport aux autres. En effet, soit la méthode converge au bout d'une soixantaine d'itérations (pour l'optimisation de 4 paramètres) soit elle diverge. Ceci dépend des paramètres initiaux; la méthode diverge si les paramètres initiaux ont des valeurs très éloignées de leurs valeurs optimales.

Nous avons donc choisi pour ce travail de thèse d'utiliser ces trois méthodes (SLSQP, L-BFGS-B, TNC) pour l'optimisation des structures de cellule solaire. Afin de nous assurer que la valeur obtenue est le rendement optimal de la cellule solaire, toutes les cellules sont optimisées plusieurs fois au moyen de ces trois différentes méthodes, et on vérifie si toutes les optimisations conduisent à la même valeur optimale du rendement de la cellule.

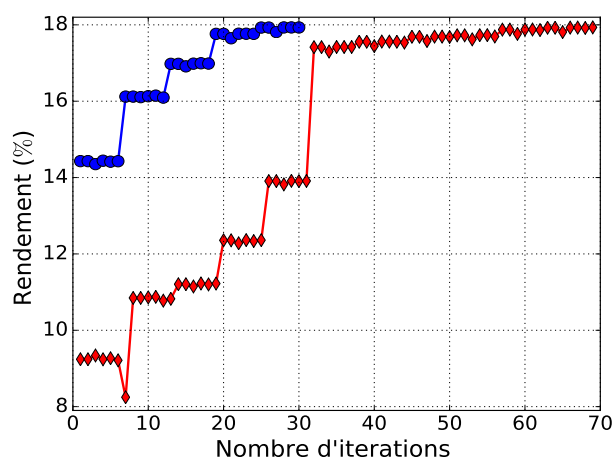


FIGURE II.4 – Profils d'optimisation du rendement de la cellule solaire PN avec la méthode SLSQP en considérant deux points initiaux différents : un point avec un rendement initial de 14,43 % et un autre un avec un rendement initial de 9,24 %.

II.3 La mise en œuvre

Dans cette partie, nous allons voir quels sont les outils utilisés pour modéliser et optimiser les structures de cellules solaires. L'approche développée ici consiste à utiliser un certain nombre de logiciels : un logiciel commercial pour la simulation et un logiciel libre pour l'optimisation. Ensuite, un couplage fort est réalisé entre les logiciels afin de permettre les échanges entre le simulateur et l'optimiseur.

II.3.1 L'outil de simulation AtlasTM (SILVACOTM)

L'outil de simulation utilisé dans cette thèse est le logiciel AtlasTM appartenant aux familles des logiciels de la société SILVACOTM (Silicon Valley Corporation). Ce dernier fait référence à un ensemble de logiciels permettant la modélisation physique et les processus de fabrication (gravure, dépôt, dopage, épitaxie...) des composants à base de semi-conducteurs. Atlas permet de prédire le comportement électrique et fournit aussi des informations sur la distribution interne des variables associées au fonctionnement du dispositif telles que, le champ électrique, le potentiel, les concentrations des porteurs de charges, etc., autant de données extrêmement importantes pour une meilleure conception et optimisation des procédés technologiques.

Les simulations sont basées sur la résolution des équations de dérive-diffusion présentées dans la partie précédente. La structure simulée est maillée et chaque point du

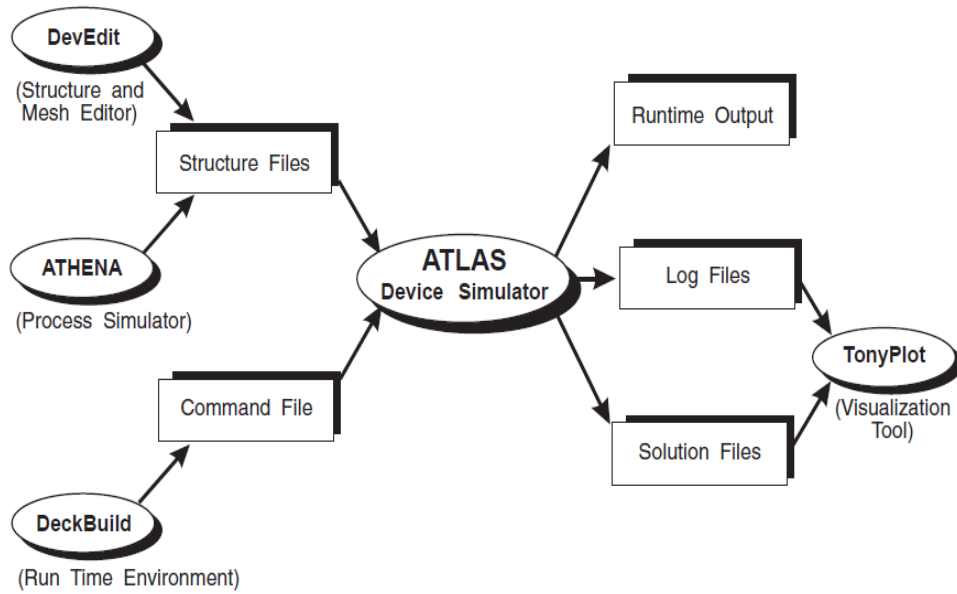


FIGURE II.5 – Fichiers d'entrée et de sortie d'Atlas [120]

maillage (nœuds) a des propriétés qui lui sont associées telles que le type et le profil de dopage, la concentration des dopants ou encore le type de matériau. Par conséquent, les grandeurs physiques comme le champ électrique, le potentiel, etc. peuvent être calculées pour chaque nœud. Le choix du maillage est donc très important pour l'obtention de bons résultats.

II.3.1.1 Le mode de fonctionnement

Le simulateur Atlas fonctionne principalement avec deux fichiers d'entrée et trois fichiers de sortie (voir figure II.5). Le fichier d'entrée (*Structure Files*), est le fichier contenant les commandes pour l'exécution d'Atlas et l'autre fichier d'entrée (*Command File*), est le fichier permettant de définir la structure qui sera simulée. Concernant les fichiers de sortie, le fichier *Runtime output* donne la progression et les messages d'erreur et d'avertissement au fur et à mesure de la simulation, le fichier *Log Files* stocke toutes les caractéristiques électriques du dispositif et enfin le fichier *Solution Files* permet de stocker les données 2D ou 3D concernant la structure en un point donné [120].

Les deux derniers fichiers de sortie (*Log Files* et *Solution Files*) sont traités par l'outil de visualisation *TonyPlot* qui permet de visualiser les résultats des simulations (structure du composant, caractéristiques électriques et toutes les autres grandeurs physiques).

L'environnement *DevEdit* est un éditeur graphique qui permet d'éditer la structure

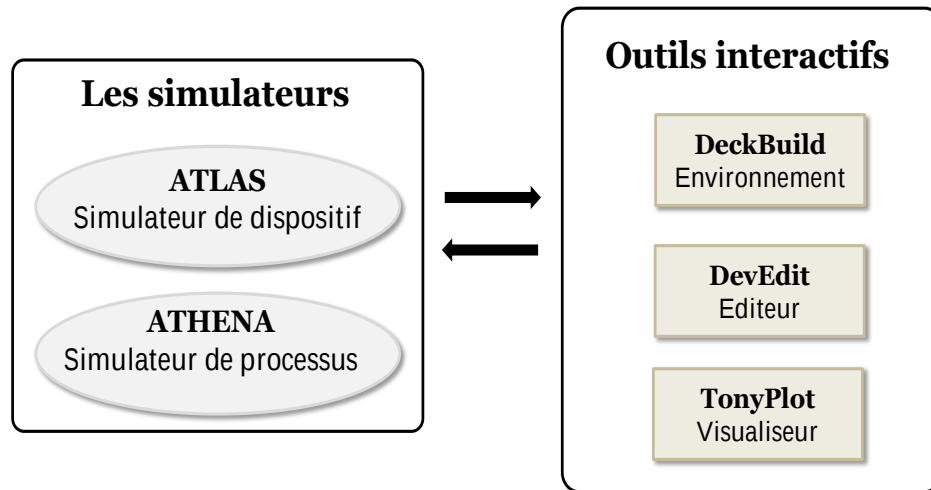


FIGURE II.6 – Les différents outils de SILVACO

(dopage, maillage, les types de matériaux)

ATHENA permet de simuler les processus de fabrication du composant effectués en salles blanches.

L'environnements *DeckBuild* permet d'écrire les commandes à exécuter et de visualiser l'exécution du code en temps réel. On peut également y définir la structure et son maillage.

En somme, ces outils de SILVACO peuvent être classés en deux catégories : les simulateurs (*Athena* et *Atlas*) et les outils interactifs permettent de communiquer avec les simulateurs (*DeckBuild*, *DevEdit* et *TonyPlot*) (figure II.6).

II.3.1.2 L'ordre de commandes d'Atlas

Le programme de simulation d'un dispositif se fait en plusieurs étapes précises dont il faut soigneusement respecter l'ordre (voir figure II.7), faute de quoi le programme ne s'exécutera pas. Les commandes fondamentales des différentes étapes sont les suivantes :

1. Définition de la structure.

- MESH : cette commande permet de créer le maillage de la structure.
- REGION : permet de définir les différentes régions d'un matériau.
- ELECTRODE : permet d'indiquer l'endroit et les noms des électrodes.
- DOPING : permet de spécifier les concentrations et les profils des dopages.

2. Spécification des modèles et des matériaux

- MATERIAL : pour définir le matériau utilisé
- MODELS : pour la définition des modèles physiques utilisés.
- CONTACT : pour indiquer les attributs physiques d'une électrode.
- INTERFACE : permet de définir les paramètres d'interface.

3. Sélection de la méthode numérique

- METHOD : pour indiquer la méthode numérique à utiliser pour résoudre les équations aux dérivées partielles.

4. Spécification des solutions

- LOG : permet de sauvegarder dans un fichier toutes les caractéristiques électriques du dispositif.
- SOLVE : cette instruction vient toujours après LOG, elle permet de chercher une solution pour un ou plusieurs points de polarisation.
- SAVE : permet de sauvegarder les informations d'un point de maillage dans un fichier de sortie.

5. Analyses des résultats

- EXTRACT : permet d'extraire les valeurs des paramètres enregistrés dans les différents fichiers.
- TONYPLOT : permet d'afficher graphiquement les résultats.

Pour les dispositifs optoélectroniques comme les cellules solaires, une autre commande (BEAM) très importante doit être déclarée au niveau 4 des groupes de commande. Elle permet de définir le faisceau lumineux incident sur le dispositif.

Afin de permettre l'optimisation des cellules solaires, le programme de simulation doit être associé à une démarche d'optimisation. Cette association permettra d'avoir un outil complet "*simulation-optimisation*", pour simuler et optimiser les dispositifs.

II.3.2 Le programme d'optimisation

Durant ce travail de thèse, nous avons utilisé un outil d'optimisation qui avait été développé au laboratoire en 2012 et 2013 dans le cadre du projet "Simulation et optimisation de cellules solaires" de l'équipe "Matériaux fonctionnels". Ce programme utilise le

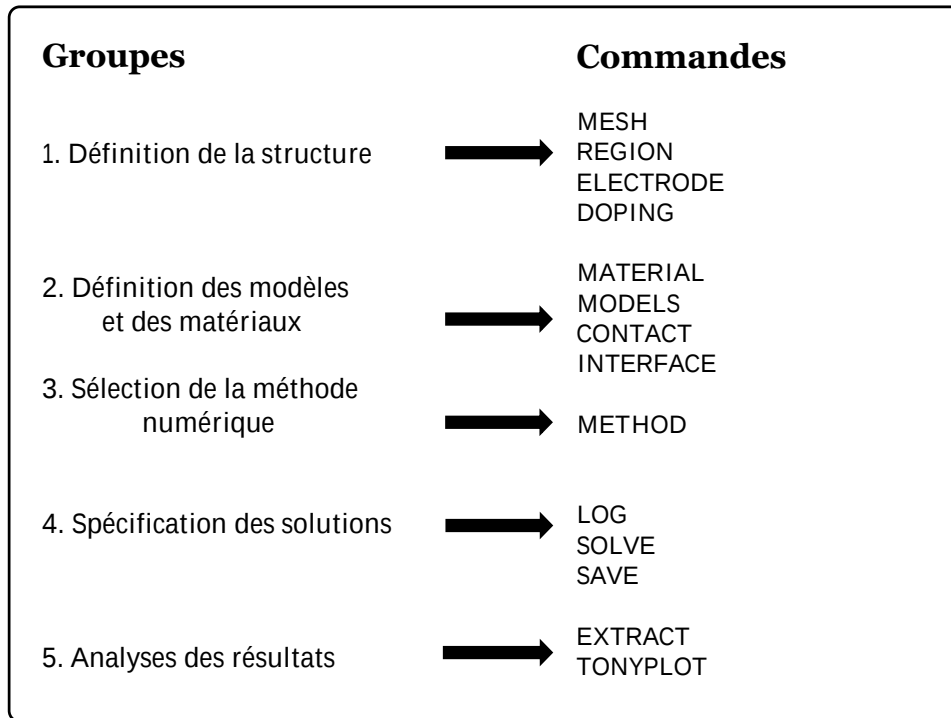


FIGURE II.7 – Ordre des commandes dans un programme Atlas

langage de programmation *Python*. C'est un langage à la fois simple d'utilisation et puissant. Il permet de bénéficier d'un ensemble de bibliothèques spécialisées dans de nombreux domaines.

Ce programme utilise la bibliothèque *SciPy*, une bibliothèque regroupant un ensemble de modules pour la programmation scientifique. Certains de ces modules sont cités ci-dessous [121] :

- *scipy.integrate* : un module pour les calculs d'intégrales.
- *scipy.interpolate* : un module utilisé pour interpoler des fonctions.
- *scipy.optimize* : un module pour l'optimisation
- *scipy.fftpack* : un module pour calcul des transformées de Fourier.
- *scipy.signal* : un module pour le traitement de signal.
- *scipy.linalg* : un module pour l'algèbre linéaire.
- *scipy.ndimage* : un module pour le traitement d'images.

C'est plus particulièrement le module *scipy.optimize* que est utilisé pour l'optimisation des structures de cellules solaires. Le module regroupe tous les algorithmes d'optimisation présentés dans la partie II.2.2.1. Il contient principalement deux types de fonctions



FIGURE II.8 – schéma illustrant le couplage du programme de simulation et d'optimisation.

permettant de minimiser une fonction : la fonction `scipy.optimize.minimize_scalar`, pour minimiser une fonction scalaire d'une seule variable et la fonction `scipy.optimize.minimize`, pour minimiser une fonction scalaire d'une ou plusieurs variables. Voulant optimiser simultanément plusieurs paramètres du dispositif, c'est donc la fonction `scipy.optimize.minimize` qui nous sera utile.

Comme nous l'avons indiqué plus haut (dans la partie II.2.2.1), seulement trois méthodes d'optimisation s'avèrent pertinentes pour les structures étudiées : la méthode *L-BFGS-B*, la méthode *TNC* et la méthode *SLSQP*. Ces méthodes ont été utilisées grâce à ce programme d'optimisation qui, en pratique, supporte toutes les autres méthodes incluses dans le module `scipy.optimize`. Le choix des méthodes étant fonction des structures étudiées.

Le programme d'optimisation gère aussi l'échange des données entre le programme de simulation et les algorithmes d'optimisation. Pour des raisons de lisibilité, le programme d'optimisation est découpé en plusieurs parties dont notamment :

- Un module d'interface qui permet de définir la méthode d'optimisation, les paramètres d'optimisation, les intervalles d'optimisation ainsi que les paramètres initiaux. Ces derniers sont choisis de manière aléatoire dans l'espace de recherche. A chaque itération, les valeurs des paramètres d'optimisation sont directement communiqués au programme de simulation (Atlas).
- Un module contenant le programme principal (optimiseur), dans lequel, on définit entre autres le rendement de la cellule (fonction objectif), calculé à partir des paramètres significatifs de la cellule solaire communiqués par le programme de simulation.

- Un module permettant la sauvegarde des différents résultats sur plusieurs fichiers regroupés dans un même dossier. Citons notamment un fichier permettant de suivre l'évolution du rendement en fonction des différents paramètres d'optimisation. Nous utilisons ensuite *Matplotlib*, une autre librairie de *Python*, qui permet le traçage et la visualisation des données, en lieu et place de *TonyPlot*, peu adapté à cette façon d'utiliser Silvaco.

Afin de bien contrôler certains modèles physiques utilisés, ces derniers sont programmés à part. De cette manière, il est possible d'utiliser des modèles empiriques, permettant ainsi d'avoir des résultats beaucoup plus réalistes. Il s'agit principalement du modèle pour la mobilité des porteurs, du modèle pour le coefficient d'absorption et du modèle pour l'indice de réfraction du matériau. Les modèles en question sont implémentés en langage C et intégrés dans le programme de simulation (voir figure II.9).

Le choix de paramètres d'optimisation est très important. Ainsi, dans notre travail de thèse, puisque nous portons notre attention sur l'optimisation du rendement de conversion de la cellule solaire, nous nous intéressons aux paramètres de la cellule susceptibles d'influencer de manière significative le rendement. Ainsi, nous optimisons principalement les différentes épaisseurs de couches de la cellule, les concentrations des différents dopages, les compositions d'indium et les travaux de sortie des métaux pour les contacts métalliques de type Schottky. En outre, pour que l'algorithme d'optimisation fonctionne comme prévu, les paramètres d'optimisation devraient avoir des plages de variation similaires. Par conséquent, ils sont normalisés à leur valeur maximale. Cependant, pour les concentrations de dopage, la quantité significative est le $\log_{10}(N_d)$, la normalisation doit donc être de type logarithmique.

Le programme d'optimisation présente plusieurs avantages. Tout d'abord, il permet d'avoir un temps de réponse très rapide, puisqu'aucun fichier intermédiaire n'est utilisé lors des différents échanges des données. De plus, ce couplage permet de bénéficier d'un ensemble d'algorithmes mathématiques très efficaces pour l'optimisation multivariée. Par ailleurs, grâce au module d'interface, nous pouvons facilement accéder à n'importe quel paramètre d'optimisation, et le modifier, sans toucher le programme de simulation. Enfin, c'est un programme qui ne dépend pas de la méthode d'optimisation utilisée. Ainsi, nous avons également la possibilité de changer la méthode d'optimisation sans pour au-

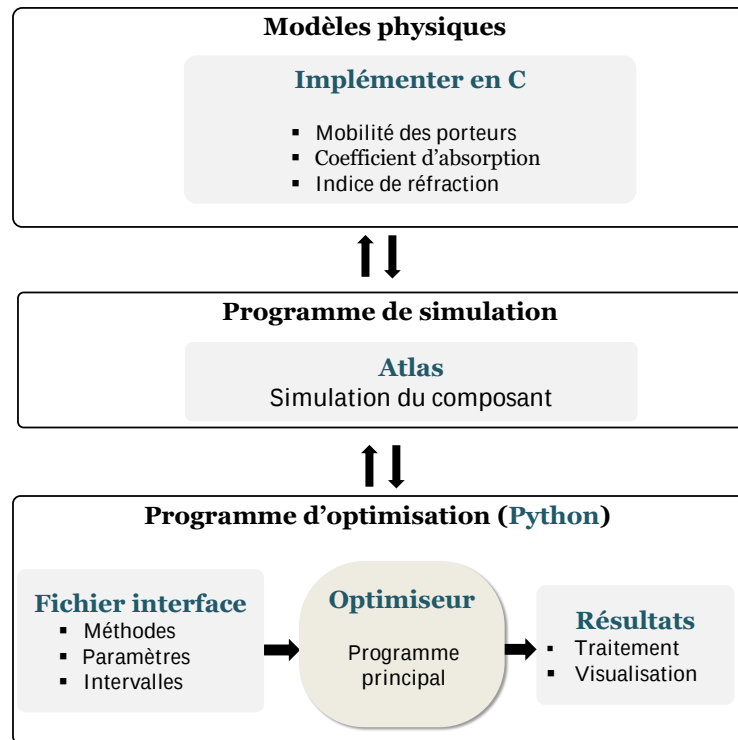


FIGURE II.9 – schéma illustrant les différents programmes utilisés pour la simulation et l'optimisation des structures de cellules solaires.

tant modifier l'optimiseur.

Le programme propose d'utiliser les méthodes d'optimisation mathématique présentées précédemment associées à des fonctions d'analyse et de traitement des données issues du simulateur (Atlas). Ce programme avait été conçu et développé au laboratoire pour la simulation et à l'optimisation de structures de cellules solaires et utilisé dans cette thèse pour cet objectif. Néanmoins, il peut très bien être adapté pour l'optimisation d'autres dispositifs.

Conclusion du chapitre

Pour conclure, ce chapitre nous a permis de présenter, dans un premier temps, le modèle dérive-diffusion utilisé dans cette thèse pour la modélisation des phénomènes de transport de charges dans les semi-conducteurs. Aussi, nous avons pu observer les différentes approches utilisées actuellement pour optimiser les structures de cellules solaires, et avons présenté, par la même occasion une nouvelle méthode, qui consiste à une optimisation multivariée des cellules solaires. Par la suite, étant donné le nombre important de méthodes d'optimisation existant dans la littérature, nous avons réalisé plusieurs

tests d'optimisation afin de choisir les méthodes adaptées au mieux à notre problème. Enfin, nous avons présenté le programme d'optimisation développé au laboratoire pour les cellules solaires InGaN et qui associe les méthodes d'optimisation mathématique et le simulateur Atlas.

III

Conception de nouvelles structures photovoltaïques à base d'InGaN

Sommaire

III.1 Cellule solaire sans couche P	78
III.1.1 Le contact métal/semi-conducteur	78
III.1.2 Simulation et optimisation d'une cellule solaire Schottky	82
III.1.3 Nouvelle structure MIN	89
III.2 Les cellules solaires conventionnelles	95
III.2.1 L'optimisation des structures PN et PIN	96
III.2.2 Comparaisons des performances	98
III.3 Réalisation technologique	100
III.3.1 Limites des performances des cellules InGaN	100
III.3.2 L'impact de la couche P	104

III.1 Cellule solaire sans couche P

Dans ce nouveau chapitre, nous présentons l'étude de nouvelles structures de cellules solaires. Certains des enjeux technologiques majeurs dans la réalisation des cellules solaires à base d'InGaN sont la difficulté de réaliser le dopage de type P et la maîtrise des procédés de fabrication des contacts métal-semi-conducteur, particulièrement dans le cas d'une couche dopé P [122, 123]. Afin de palier donc ces problèmes liés à la couche P, nous avons simulé et optimisé les performances de structures de cellules solaires sans la couche P (structure Schottky). Il s'agit de structures dans lesquelles la jonction PN est remplacée par une jonction métal-semi-conducteur. En effet, nous avons vu dans la section I.1.1 du chapitre I que pour créer un courant électrique à partir d'une cellule solaire, il faut dissocier les paires électron-trou photogénérées et les collecter dans un circuit électrique extérieur avant leurs recombinaisons au sein du matériau semi-conducteur. La séparation des paires électron-trou se fait généralement par la création d'une barrière de potentiel dans le semi-conducteur, cela par le biais d'une jonction PN, mais également par le biais d'une jonction métal-semi-conducteur. Cette approche nous a été suggérée par l'optimisation elle-même lors de l'optimisation des structures PN. Elle avait en effet tendance à suggérer l'utilisation de couches P ultra fines, à la limite basse imposée. Nous avons donc testé la solution consistant à la supprimer purement et simplement.

III.1.1 Le contact métal/semi-conducteur

Le contact entre une couche métallique et un semi-conducteur peut se comporter différemment selon la structure des bandes d'énergie à l'interface [5, 124]. En effet, il peut se comporter soit comme un contact Schottky, soit comme un contact ohmique. Le contact Schottky permet l'établissement d'une barrière de potentiel dont l'origine est une zone de charge d'espace (ZCE) dans le semi-conducteur. Le contact ohmique est, quant à lui très important pour pouvoir réaliser l'interconnexion électrique des différents dispositifs d'un système électronique [5].

III.1.1.1 Le travail de sortie d'un matériau

Le type de contact métal-semi-conducteur est déterminé par rapport à la différence entre le travail de sortie du métal ($q\phi_m$) et le travail de sortie du semi-conducteur ($q\phi_s$)

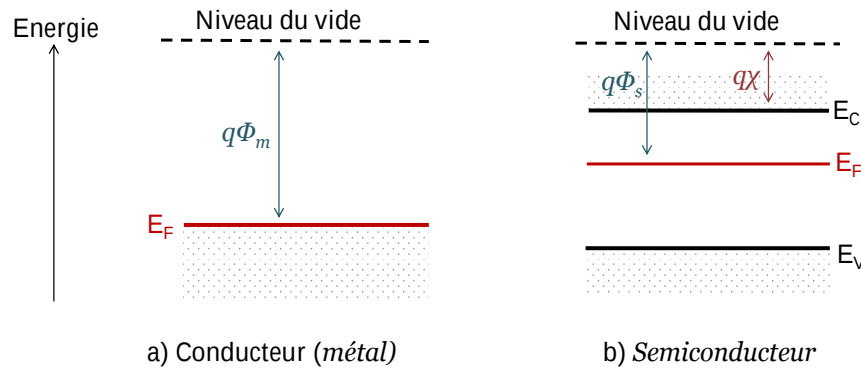


FIGURE III.1 – Définition du travail de sortie et de l'affinité électronique : a) pour un métal, b) pour un semi-conducteur.

Éléments	Cr	Au	Pt
Travail de Sortie (eV)	4,6	4,8	5,65

TABEAU III.1 – Travaux de sortie de certains métaux et à fort travail de sortie [125, 126]

[5]. Le travail de sortie est l'énergie minimum nécessaire pour extraire un électron du matériau depuis le niveau de Fermi d'énergie E_f . Il est donc défini comme étant la différence d'énergie entre le niveau du vide (NV) et le niveau de Fermi du métal ou du semi-conducteur. Cependant, pour un semi-conducteur, $q\phi_s$ n'est pas une constante physique du matériau. En effet, $q\phi_s$ dépend du niveau de Fermi qui, lui, dépend du dopage. Ainsi pour un semi-conducteur, c'est plutôt l'affinité électronique, $q\chi$ (différence d'énergie entre le niveau de vide et le bas de la bande de conduction (E_C)) qui est plus représentative (figure III.1).

Le travail de sortie d'un métal est donc donné par : $q\phi_m = NV - E_F$ et l'affinité électronique est donnée par : $q\chi = NV - E_C$ [5]. Dans les tableaux III.1 et III.2, nous avons rapporté respectivement, les travaux de sortie de certains métaux et l'affinité électronique de InN et de GaN.

Éléments	InN	GaN
Affinité électronique (eV)	5,6	4

TABEAU III.2 – Affinités électroniques de InN et de GaN. Celle de InGaN est obtenue avec une interpolation linéaire entre les valeurs de InN et de GaN avec un paramètre de courbure ($b=0,8$ eV) [27, 66].

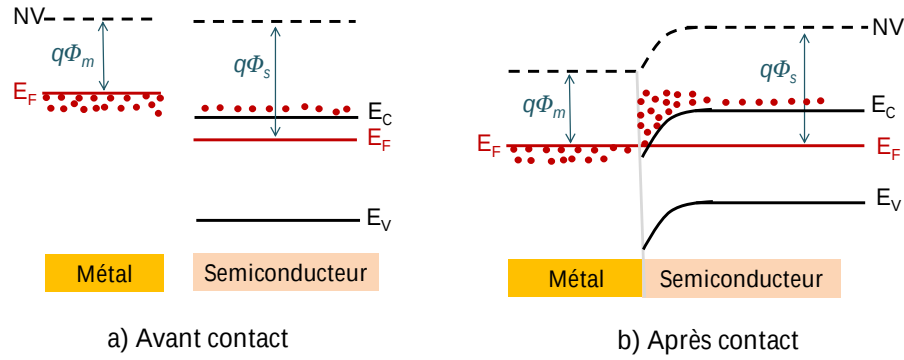


FIGURE III.2 – Diagramme des bandes d'énergie, cas où $\phi_m < \phi_s$: a) avant contact, b) après contact.

Considérons maintenant le cas d'un semi-conducteur de type N :

- lorsque $\phi_m < \phi_s$, le niveau énergétique des électrons à l'interface du métal est plus grand que celui du semi-conducteur, les électrons vont donc passer du métal vers le semi-conducteur jusqu'à l'alignement des niveaux de Fermi (équilibre thermodynamique). Il apparaît donc à la surface du métal, un déficit d'électrons et une accumulation d'électrons dans le semi-conducteur. Il en résulte une courbure des bandes d'énergie du côté du semi-conducteur qui se manifeste vers le bas et le contact ainsi obtenu est ohmique (voir figure III.2).
- lorsque $\phi_m > \phi_s$, les électrons du semi-conducteur à l'interface, possèdent une plus grande énergie que ceux du métal et vont donc diffuser vers ce dernier jusqu'à l'alignement des niveaux de Fermi. Ce mouvement d'électrons fait apparaître une accumulation d'électrons à l'interface du métal et une zone de charge d'espace qui s'étend coté semi-conducteur. Comme pour une jonction PN, un champ électrique s'établit et équilibre les forces de diffusion des porteurs. Cette fois-ci, la courbure des bandes d'énergie se manifeste vers le haut et le contact ainsi obtenu est un contact Schottky (voir figure III.3).

III.1.1.2 La cellule solaire Schottky

La conversion photovoltaïque provient de la séparation des porteurs photogénérés par le biais d'une zone de charge d'espace (ZCE) dans le matériau. Cette ZCE peut être créée par une jonction PN mais aussi, comme nous venons de le voir par une jonction métal-semi-conducteur. La cellule solaire Schottky est basée sur cette dernière avec un semi-conducteur de type N dans le cas où $\phi_m > \phi_s$. La ZCE ainsi créée s'étend dans le semi-

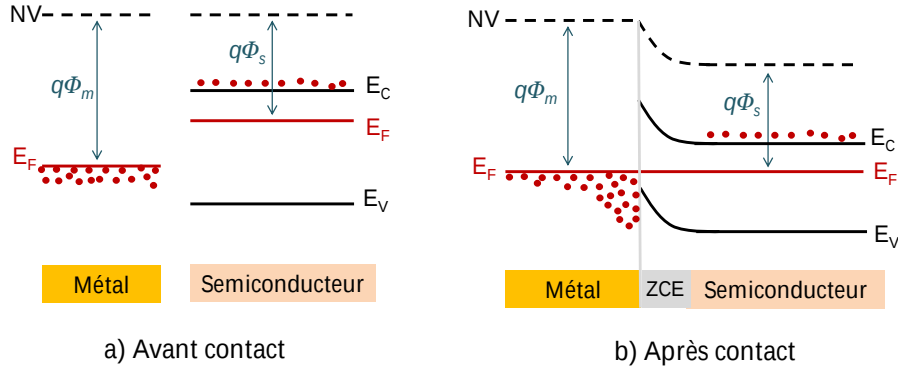


FIGURE III.3 – Diagramme des bandes d'énergie, cas où $\phi_m > \phi_s$: a) avant contact, b) après contact.

conducteur et sa largeur dépend de la hauteur de la barrière de potentiel qui s'oppose au passage des électrons du métal vers le semi-conducteur donnée par :

$$q\phi_B = q\phi_m - q\chi \quad (\text{III.1})$$

Plus $q\phi_B$ augmente et plus la largeur de la ZCE augmente. Sachant que les performances de la cellule dépendent, entre autres, de la largeur de la ZCE, nous pouvons aisément constater qu'il faudra envisager l'utilisation d'un métal ou alliage à fort travail de sortie. Ainsi, le métal envisagé ici, pour nos structures de cellules solaires, est le platine. Dans la littérature les mesures expérimentales donnent des valeurs dont la variation se situe entre 5,6 à 6,35 eV [127–129]. Cette disparité des travaux de sorties est due à la réaction d'adsorption de certains éléments chimiques (O, Au, Ag, halogènes) sur le platine [127, 130]. Gossenberger et al. [130] ont montré que l'absorption du fluor permettrait par exemple, d'atteindre un travail de sortie supérieur à 7 eV. D'autres matériaux pourraient être envisagés pour la réalisation du contact et notamment le graphène qui fait l'objet d'un intense travail de recherche [131] mais son travail de sortie (≈ 4.6 eV) [132] ne permet pas de réaliser le contact Schottky sur InGaN.

Lorsque la cellule est éclairée, les photons d'énergie supérieure à la bande d'énergie interdite du semi-conducteur vont créer des paires électron-trou qui sont ensuite séparées par le champ électrique interne créé dans la ZCE. Toutefois, il est nécessaire que la couche métallique utilisée soit suffisamment fine pour permettre la pénétration du rayonnement solaire dans le semi-conducteur. Le transport du courant est dû principalement aux porteurs majoritaires (les électrons), on parle alors d'un dispositif à porteurs majoritaires, contrairement à la jonction PN, où ce sont les porteurs minoritaires qui in-

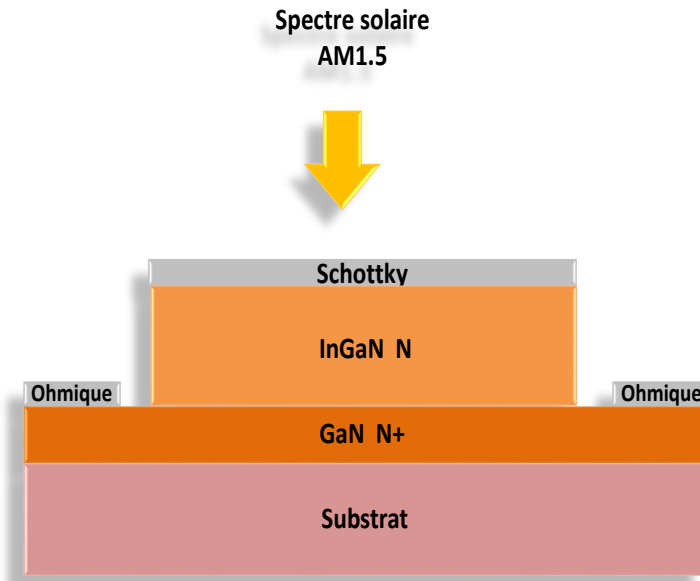


FIGURE III.4 – Cellule solaire Schottky à base d'InGaN.

terviennent.

III.1.2 Simulation et optimisation d'une cellule solaire Schottky

III.1.2.1 Les performances de la cellule

Nous avons mené une étude complète d'une structure de cellule solaire Schottky à base d'InGaN. La figure III.4 présente une vue schématique de la cellule. Elle est constituée d'une couche métallique de 5 nm en contact intime avec une couche d'InGaN dopée N dont la concentration des dopants et l'épaisseur seront optimisées. En pratique, toutes les structures étudiées dans cette thèse peuvent être réalisées en utilisant les méthodes classiques de croissance sur un substrat tel que le saphir avec une couche tampon de GaN fortement dopé N entre le substrat et la cellule [32, 33]. Les métallisations ohmiques de type N sont réalisées en surface de la couche de GaN fortement dopée pour assurer un bon contact. Les contacts ohmiques en face avant sont réalisés en transverse avec le contact Schottky. La structure est ensuite mise sous un éclairement AM1.5 qui est l'éclairement standard de tests d'évaluation des cellules solaires photovoltaïques. Il correspond à une puissance lumineuse incidente de $1000\text{W}/\text{m}^2$ et une température de 25°C .

Nous avons optimisé simultanément quatre paramètres de la structure : le dopage de type N (N_d) de la couche InGaN, son épaisseur (d_n), la concentration d'indium dans

$In_xGa_{(1-x)}N$ (x) et le travail de sortie (W_f) de la couche métallique.

Ces paramètres doivent cependant être contraints dans des intervalles de variation dans lesquels ils sont significatifs notamment en termes physiques et technologiques (voir tableau III.3). La composition d'indium, les épaisseurs de couche et le travail de sortie sont normalisés à 1. Pour le dopage, il est normalisé logarithmiquement ($\log_{10}$) à sa valeur maximale.

Nous avons choisi le dopage de type N, entre un dopage résiduel minimal de $10^{16} cm^{-3}$ et un dopage maximal de $10^{19} cm^{-3}$. Nous avons alors, $N_d \in [10^{16} - 10^{19}] cm^{-3}$.

La valeur minimale de l'épaisseur de la couche InGaN a été prise à 100 nm, ce qui garantit l'absorption d'une partie importante des longueurs d'ondes du spectre. Sa valeur maximale est de $1 \mu m$. Nous avons alors, $d_n \in [0,1 - 1,0] \mu m$. La valeur maximale de l'épaisseur est naturellement contrainte par l'intervalle de composition d'indium choisi : plus la composition d'indium dans InGaN est grande (sur un substrat de GaN), plus l'épaisseur maximale réalisable sera faible.

La variation de la concentration d'indium dans $In_xGa_{(1-x)}N$ est autorisée sur toute la gamme des concentrations : $x \in [0 - 1]$.

Enfin, pour le travail de sortie du métal, nous avons choisi de le contraindre entre les forts travaux de sortie de métaux et alliages existants. Nous avons donc, $W_f \in [5,1 - 6,3] eV$.

Le programme d'optimisation doit donc trouver le quadruplet optimal ($N_d; d_n; x; W_f$) donnant le rendement de conversion maximal de la cellule solaire. Le rendement (η) optimal ainsi obtenu est de 18,2% avec les paramètres d'optimisation suivants : ($N_d; d_n; x; W_f$) = ($6,5 \cdot 10^{16} cm^{-3}; 0,86 \mu m; 0,56; 6,3 eV$). Nous avons rapporté dans le tableau III.3, toutes ces valeurs ainsi que celles des paramètres significatifs de la cellule qui sont : la tension de circuit ouvert (V_{CO}), le courant de court-circuit (I_{CC}) et le facteur de remplissage (FF). La figure III.5 représente les caractéristiques courant-tension et puissance-tension de la cellule solaire obtenus avec les paramètres optimaux.

Ces résultats montrent la pertinence d'une telle approche qui permet de se passer de la couche P (qui est très problématique actuellement) et avoir une cellule solaire avec des performances comparables aux structures avec couche P. Un point essentiel d'une telle

Paramètres d'optimisation	$N_d(cm^{-3})$	$d_n(\mu m)$	x	$W_f(eV)$
Intervalles d'optimisation	$[10^{16} - 10^{19}]$	$[0,1 - 1,0]$	$[0 - 1]$	$[5,1 - 6,3]$
Paramètres optimaux	$6,5 \cdot 10^{16}$	0,86	0,56	6,3
Paramètres significatifs de la cellule	$V_{CO}(V)$	$I_{CC}(mA/cm^2)$	FF(%)	$\eta(\%)$
	0,863	26,80	78,82	18,2

TABLEAU III.3 – Les paramètres et intervalles d'optimisation, les paramètres optimaux et les paramètres significatifs de la cellule solaire Schottky. V_{CO} est la tension de circuit ouvert, I_{CC} , le courant de court-circuit et FF, le facteur de remplissage.

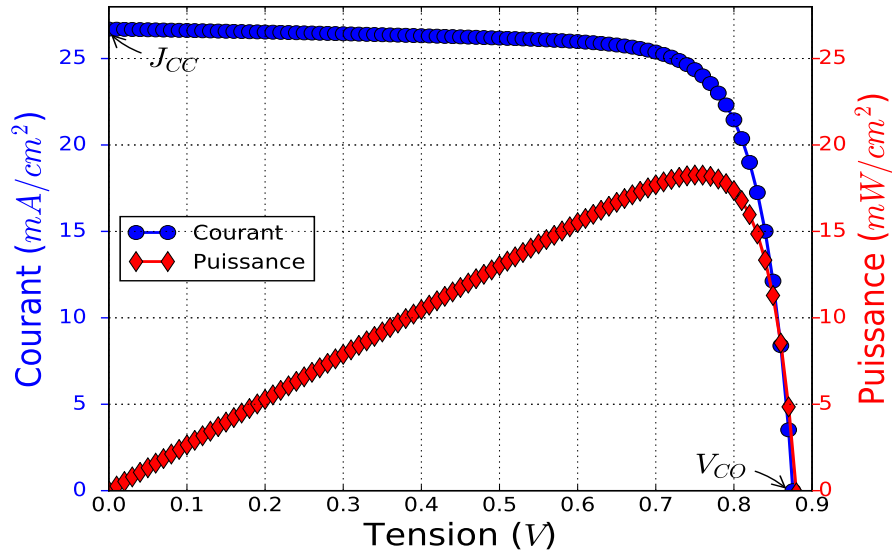


FIGURE III.5 – Caractéristiques courant-tension et puissance-tension de la cellule solaire Schottky obtenus avec les paramètres optimaux.

structure viendrait du choix de la couche métallique. En effet, cette dernière couvre la face d'éclairement de la cellule. Un dépôt d'une couche épaisse ferait obstacle à l'absorption des rayonnements solaires. D'où l'utilisation d'une fine couche de 5nm qui permet d'avoir une couche semi-transparente qui laisse passer une grande partie des photons incidents. Cette épaisseur a été choisie après une étude de l'impact de l'épaisseur, du spectre d'absorption et de la résistance spécifique du contact sur les performances de la cellule solaire. En outre, comme le montre l'optimisation, cette couche doit avoir un travail de sortie le plus élevé possible (6,3eV) afin de garantir les 18,2% de rendement de la cellule.

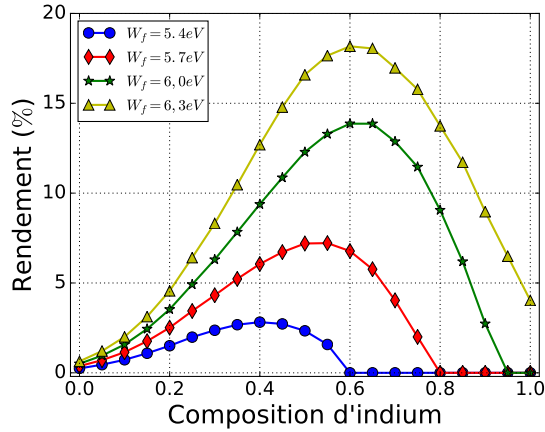


FIGURE III.6 – Variation du rendement en fonction de la composition d'indium, x , pour différents travaux de sortie du métal. Les autres paramètres d'optimisation sont maintenus à leurs valeurs optimales.

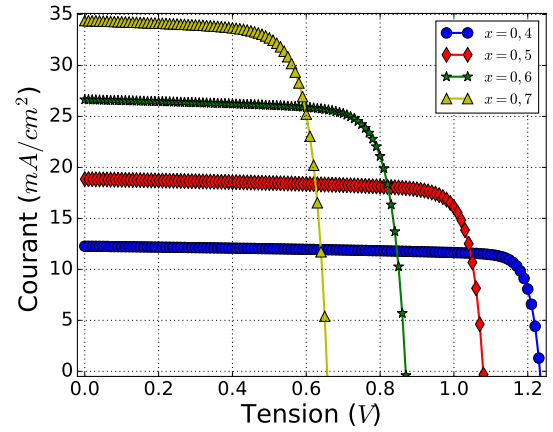


FIGURE III.7 – Caractéristiques courant-tension pour différentes compositions d'indium, x . Les autres paramètres d'optimisation sont maintenus à leurs valeurs optimales.

III.1.2.2 L'impact des paramètres sur le rendement

Après avoir obtenu les performances optimales de la cellule solaire, nous avons estimé l'impact des différents paramètres sur le rendement, notamment celui de la composition d'indium et du travail de sortie.

III.1.2.2.1 La variation de la composition d'indium

Dans un premier temps, nous avons étudié l'impact de la composition d'indium dans le matériau. La figure III.6 représente la variation du rendement en fonction de la composition d'indium pour différents travaux de sortie du métal. Les autres paramètres d'optimisation sont maintenus à leurs valeurs optimales. Pour un travail de sortie donné, l'augmentation de la composition d'indium entraîne un maximum du rendement qui croît avec l'augmentation du travail de sortie. Cette variation du rendement est due aux variations opposées du I_{CC} et du V_{CO} . En effet, dans la figure III.6, nous avons représenté les caractéristiques courant-tension pour différentes compositions d'indium, nous pouvons observer que l'augmentation de la composition d'indium entraîne une augmentation du I_{CC} et en même temps une diminution du V_{CO} . Ceci est dû au fait que l'augmentation de la composition d'indium provoque des modifications de l'ensemble des paramètres de la couche active, notamment, le spectre d'absorption et la largeur de la bande d'énergie interdite. L'augmentation du I_{CC} est donc due à l'amélioration de l'absorption de la lu-

mière tandis que la diminution du V_{CO} est due au rétrécissement de la bande d'énergie interdite.

La composition d'indium dans InGaN revêt d'une importance primordiale pour les performances de la cellule solaire. La composition optimale pour cette structure se situe autour de 0,56 ($E_g = 1,54\text{eV}$) pour un travail de sortie de la couche métallique de $6,3\text{eV}$.

III.1.2.2.2 La variation du travail de sortie du métal

La figure III.8 représente la variation du rendement en fonction du travail de sortie du métal, W_f , pour différentes compositions d'indium, x . Les autres paramètres d'optimisation sont maintenus à leurs valeurs optimales. L'augmentation du travail de sortie du métal conduit à un élargissement de la zone de charge d'espace (ZCE), augmentant ainsi le champ électrique dans la jonction, comme le montre la figure III.10.

Nous avons représenté dans la figure III.9, les caractéristiques courant-tension pour différents travaux de sortie du métal. Nous pouvons constater que lorsque le travail de sortie augmente et donc la ZCE, le V_{CO} augmente et dans une moindre mesure, le FF aussi, ce qui explique l'augmentation des performances de la cellule.

Comme la composition d'indium, le travail de sortie du métal a un impact important sur les performances de la cellule solaire Schottky. Il doit en effet, être le plus élevé possible comme le montre les figures III.6 et III.8. Par ailleurs, sur la figure III.8, on voit que pour une composition d'indium donnée, il existe un seuil minimal du travail de sortie au-delà duquel le rendement devient nul. En effet, l'augmentation de la composition d'indium entraîne une augmentation de l'affinité électronique. Ceci se traduit par une diminution de la hauteur de barrière de potentiel (ϕ_B) entre la couche métallique et la couche d'InGaN, ce qui peut changer le contact Schottky en contact ohmique. Par exemple, pour une composition d'indium de 0,6, le seuil se situe à $5,4\text{eV}$. Une couche métallique avec un travail de sortie inférieur à $5,4\text{eV}$ ne peut donc pas permettre de réaliser un contact Schottky. Le contact ainsi formé est ohmique. Il devient Schottky pour les travaux de sortie supérieurs à $5,4\text{eV}$.

III.1.2.2.3 L'effet de la couche interfaciale

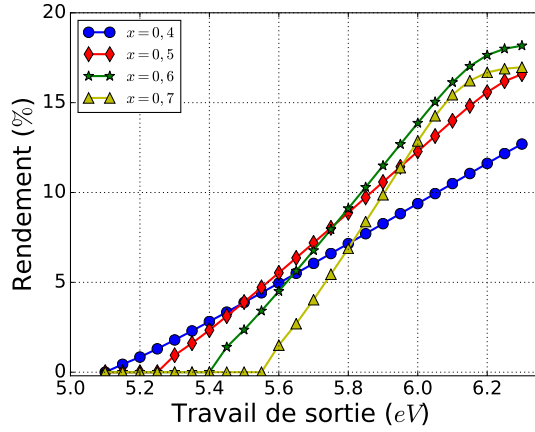


FIGURE III.8 – Variation du rendement en fonction du travail de sortie du métal, W_f , pour différentes compositions d'indium, x . Les autres paramètres d'optimisation sont maintenus à leurs valeurs optimales.

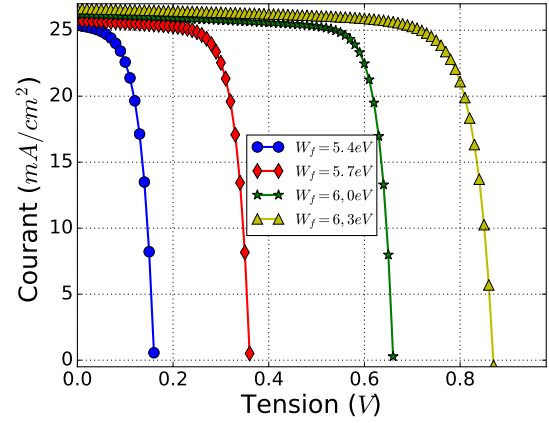


FIGURE III.9 – Caractéristiques courant-tension pour différents travaux de sortie du métal, W_f . Les autres paramètres d'optimisation sont maintenus à leurs valeurs optimales.

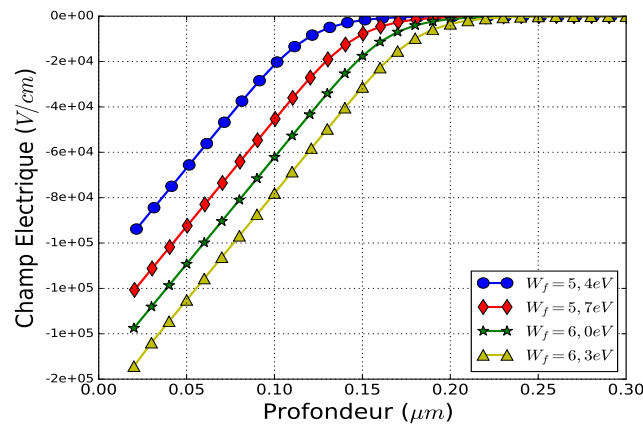


FIGURE III.10 – Variation du champ électrique dans la structure pour différents travaux de sortie du métal, W_f .

$N_d^+(\text{cm}^{-3})$	1.10^{19}cm^{-3}	3.10^{19}cm^{-3}	5.10^{19}cm^{-3}
$V_{CO}(\text{V})$	0,96	0,97	0,92
$I_{CC}(\text{mA}_c\text{m}^2)$	23,34	23,07	22,63
FF(%)	79,2	79,0	54,04
$\eta(\%)$	17,74	17,67	11,25

TABLEAU III.4 – Tension de circuit ouvert (V_{CO}), courant de court-circuit (I_{CC}), facteur de remplissage (FF) et le rendement pour différentes concentrations de dopage de la couche interfaciale (N_d^+). Les paramètres d'optimisation sont maintenus à leurs valeurs optimales.

Le contact Métal-Nitruire-III présente potentiellement une fine couche interfaciale qui peut être due à plusieurs facteurs : une irradiation ionique, un traitement thermique tel que le recuit, la diffusion interfaciale des porteurs, les phénomènes de polarisation du matériau ou encore les défauts de surface [133]. Nous pouvons modéliser cela par une fine couche interfaciale fortement dopée , avec, d'une part, une concentration de l'ordre de 10^{19}cm^{-3} lorsqu'elle est induite par une irradiation ionique à haute énergie [134] et d'autre part, une concentration d'environ 5.10^{18}cm^{-3} , lorsqu'elle est induite par les défauts natifs [135]. Nous avons donc modélisé une fine couche de 5 nm dopée N entre la couche métallique et la couche InGaN. Nous avons ensuite fait varier son dopage entre 10^{17}cm^{-3} et 10^{20}cm^{-3} afin d'étudier l'impact de cette couche sur le rendement de la cellule.

La figure III.11 représente la variation du rendement en fonction de la concentration de dopage de la couche interfaciale. Le rendement optimal obtenu (18,2%) reste pratiquement inchangé pour les dopages inférieurs à 4.10^{19}cm^{-3} . Au-delà de ce dernier, le rendement commence à diminuer et passe à 11,25% pour un dopage de 5.10^{19}cm^{-3} . On observe donc un effet de seuil à 4.10^{19}cm^{-3} , au-dessous duquel le rendement de la cellule diminue considérablement. En effet, les forts dopages de la couche interfaciale affectent les caractéristiques courant-tension de cellule, entraînant ainsi une diminution du FF qui passe de 79% à 54% lorsque le dopage passe de 1.10^{19}cm^{-3} à 5.10^{19}cm^{-3} comme le montre le tableau III.4. Le contrôle de la qualité des interfaces Métal/InGaN est donc fondamental, afin de garantir de bonnes performances de la cellule. La concentration des charges piégées à l'interface doit être maintenue à un niveau inférieur à 5.10^{19}cm^{-3} .

Comme on vient de le voir, la cellule solaire Schottky peut être une bonne alternative

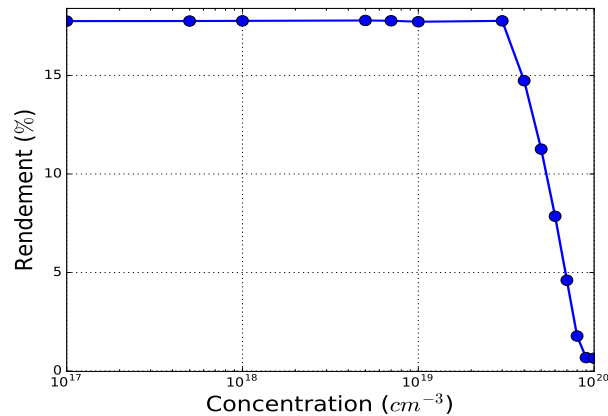


FIGURE III.11 – Variation du rendement en fonction de la concentration de dopage de la couche interfaciale. Les paramètres d'optimisation sont maintenus à leurs valeurs optimales.

pour éviter le dopage de type P des cellules solaires à base d'InGaN. Le rendement optimal de 18,2% obtenu est comparable à ceux obtenus avec les différentes technologies de cellules solaires en couches minces [3]. Cependant, avec moins de couches et, par conséquent, moins de matériau, cette nouvelle technologie devrait être relativement simple et moins coûteuse à fabriquer. En outre, on pourrait facilement utiliser la technologie InGaN pour les LED, une technologie déjà bien établie. Toutefois, une composition d'indium de l'ordre de 0,56 est difficile à atteindre aujourd'hui. C'est l'objectif de beaucoup de travaux de recherche [32, 136]. Ainsi, lorsqu'on ramène la composition d'indium dans des proportions réalisables, par exemple à 0,4 le rendement de la cellule reste aux alentours de 13%. De la même manière, lorsque l'on diminue le travail de sortie du métal jusqu'à 6,0eV, le rendement de la cellule reste supérieur à 13% comme nous pouvons le voir sur la figure III.8. Cette étude a fait l'objet d'une publication dans la revue *Materials Science in Semiconductor Processing* [137].

III.1.3 Nouvelle structure MIN

III.1.3.1 Performances de la cellule

Nous allons voir dans cette partie, les performances d'une autre nouvelle structure de cellule solaire basée également sur un contact Schottky, que nous avons nommé "structure MIN" (Métal/InGaN-I/InGaN-N). La structure est inspirée de la structure PIN sans couche P. Elle est donc composée d'une fine couche métallique, d'une couche InGaN intrinsèque et d'une couche InGaN dopée N (figure III.12). La couche métallique possède une épaisseur de 5 nm, quant aux épaisseurs et les dopages des autres couches, elles vont

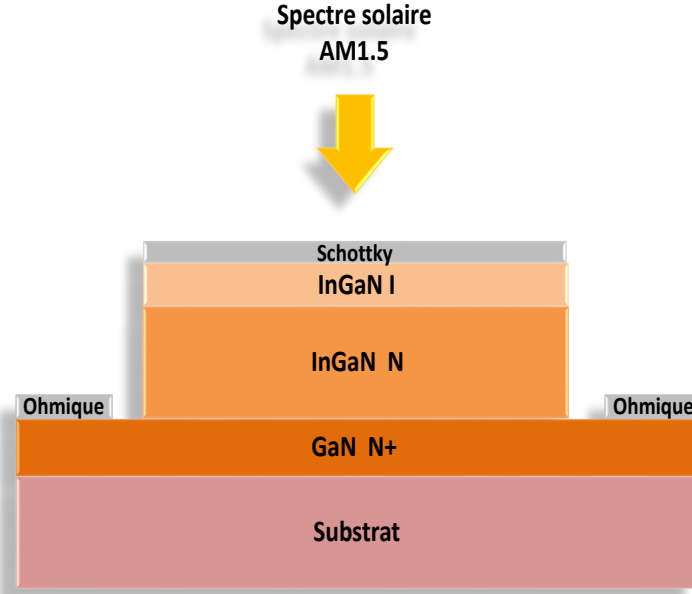


FIGURE III.12 – Structure de la cellule solaire MIN à base à base d'InGaN.

être optimisés. En pratique, Il n'est pas possible d'avoir une couche InGaN parfaitement intrinsèque. Ainsi, la couche I sera donc une couche légèrement dopée N car l'alliage InGaN est intrinsèquement de type N [51, 52]. L'objectif d'une telle structure est d'élargir la ZCE qui va s'étendre très largement dans la couche I du fait de sa très faible concentration en dopants [3]. Ainsi, avoir une ZCE suffisamment grande permettra d'avoir l'essentiel des paires électron-trou créé dans cette zone, et par conséquent, d'augmenter le photocourant.

Pour cette structure, nous avons optimisé simultanément six paramètres de la cellule solaire : le travail de sortie du métal, la composition d'indium dans InGaN x , le dopage de la couche I (N_i), l'épaisseur de la couche I (d_i), le dopage de la couche N (N_d) et l'épaisseur de la couche N (d_n). L'épaisseur de la couche I a été permise entre 0,1 et 1,0 μm : $d_i \in [0,1 - 1,0] \mu m$. Le dopage de la couche I est permis entre $10^{14} cm^{-3}$ et $10^{17} cm^{-3}$: $N_i \in [10^{14} - 10^{17}] cm^{-3}$. Nous avons choisi, pour ce dopage intrinsèque, une valeur très faible par rapport à celle rapportée dans la littérature [138] afin d'avoir une plage d'intervalle un peu plus grande et ainsi identifier où se situe vraiment l'optimum. Pour les autres paramètres, nous avons considéré les mêmes intervalles d'optimisation que ceux définis pour l'optimisation de la structure Schottky (voir tableau III.5)

Ici, le programme d'optimisation doit trouver le sextuplet optimal (N_i ; L_i ; N_d ; d_n ; x ; W_f)

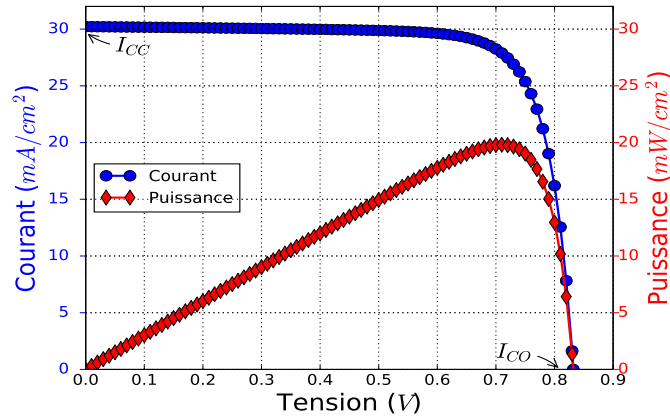


FIGURE III.13 – Caractéristiques courant-tension et puissance-tension de la cellule solaire MIN obtenus avec les paramètres optimaux.

Paramètres d'optimisation	$N_i(cm^{-3})$	$d_i(\mu m)$	$N_d(cm^{-3})$	$d_n(\mu m)$	x	$W_f(eV)$
Intervalles d'optimisation	$[10^{14} - 10^{17}]$	$[0, 1 - 1, 0]$	$[10^{16} - 10^{19}]$	$[0, 1 - 1, 0]$	$[0 - 1]$	$[5, 1 - 6, 3]$
paramètres optimaux	$6, 1.10^{16}$	0,61	$3, 6.10^{17}$	0,83	0,60	6,30
Paramètres significatifs de la cellule			$V_{CO}(V)$	$I_{CC}(mA/cm^2)$	FF(%)	$\eta(\%)$
			0,835	30,29	78,39	19,8

TABEAU III.5 – Les paramètres et intervalles d'optimisation, les paramètres optimaux et les paramètres significatifs de la cellule solaire MIN. V_{CO} est la tension de circuit ouvert, I_{CC} , le courant de court-circuit et FF, le facteur de remplissage.

donnant le rendement de conversion maximal de la cellule solaire. Le rendement (η) optimal ainsi obtenu pour cette structure est de 19,8% avec les paramètres d'optimisation suivants :

$$(N_i; d_i; N_d; d_n; x; W_f) = (6, 1.10^{16}cm^{-3}; 0,61\mu m; 3, 6.10^{17}cm^{-3}; 0,83\mu m; 0,60; 6,30eV).$$

Toutes ces valeurs ainsi que celles des paramètres significatifs de la cellule sont rapportées dans le tableau III.5. La figure III.13 représente les caractéristiques courant-tension et puissance-tension de la cellule solaire obtenus avec les paramètres optimaux. La cellule présente un point de fonctionnement optimal de 19,8mW/cm².

En raison de l'absence d'une couche P, la zone de charge d'espace s'étale uniquement dans la région I. Le champ électrique résultant est présenté sur la figure III.14. Comme pour une jonction PN, le champ électrique présente une amplitude maximale aux jonctions. Il est beaucoup plus important à l'équilibre thermodynamique ($V = 0, 0V$) que hors équilibre, par exemple à $V = V_{CO}$. En effet à $V = V_{CO}$ la jonction se comporte comme polarisée en direct, le champ électrique externe induit va s'opposer au champ interne d'où la

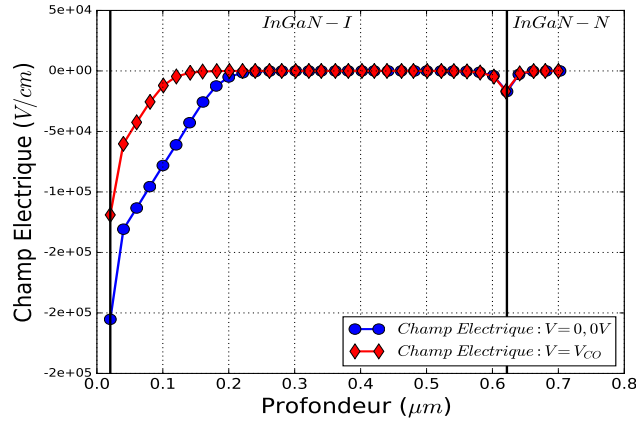


FIGURE III.14 – Champs électriques à travers la structure à l'équilibre thermodynamique (cercles) et à $V=V_{CO}$ (diamants).

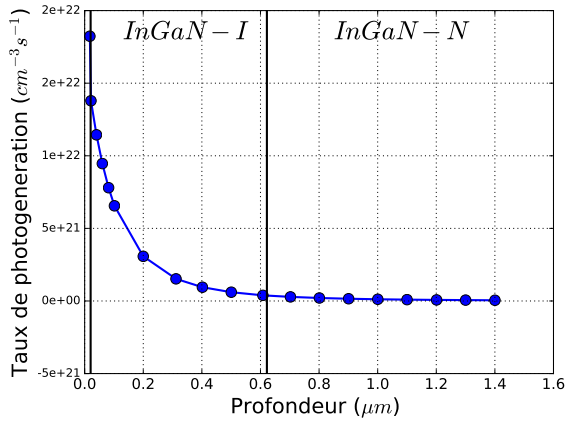


FIGURE III.15 – Variations du taux de photogénération à travers la structure.

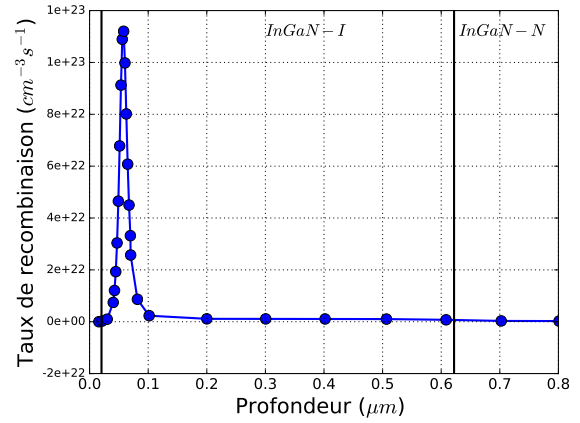


FIGURE III.16 – Variations du taux de recombinaison à travers la structure.

diminution de ce dernier. La figure III.15 présente le taux de photogénération de porteurs dans la structure. Nous observons un taux très élevé tout près de la couche métallique qui diminue et tend vers zéro très rapidement. Cette diminution est due à un taux de recombinaison qui est également plus élevé (voir figure III.16) à cause des faibles durées de vie (temps moyen entre la création d'une paire électron-trou et sa recombinaison) des porteurs minoritaires dans l'InGaN qui est de l'ordre de la nanoseconde (correspondant à une longueur de diffusion de l'ordre de quelques centaines de nanomètres) [139] [95]. En guise de comparaison, le silicium possède des durées de vie qui peuvent atteindre les millisecondes (correspondant à des longueurs de diffusion qui peuvent atteindre le millimètre) [139].

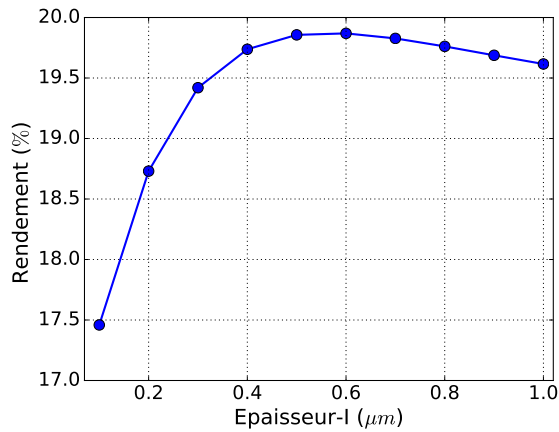


FIGURE III.17 – Variation du rendement de la cellule en fonction de l'épaisseur de la couche I (d_i).

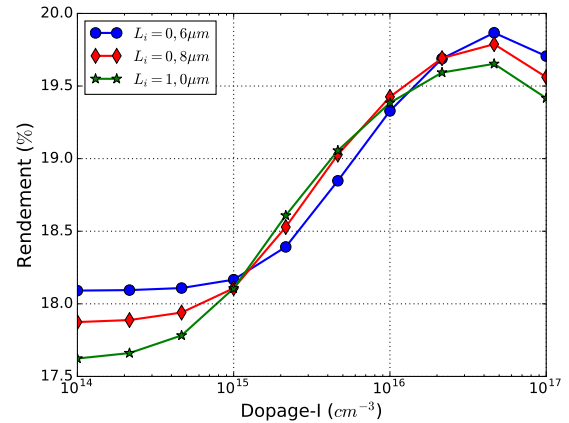


FIGURE III.18 – Variation du rendement de la cellule en fonction du dopage de la couche intrinsèque, pour différentes épaisseurs de la couche I (d_i).

III.1.3.2 Fiabilité des performances

La principale différence entre la structure Schottky que nous avons vu précédemment, et la structure MIN, est la présence d'une couche intrinsèque dans la structure MIN. Nous avons donc étudié l'influence de cette couche intrinsèque sur les performances de la cellule solaire. Dans la figure III.17, nous avons analysé la variation du rendement de la cellule en fonction de l'épaisseur de la couche I (d_i), alors que dans la figure III.18, c'est la variation du rendement en fonction du dopage I, pour différent d_i .

La valeur optimale de l'épaisseur I, comme la montre la figure III.17, est d'environ 0,60 μm . L'augmentation de l'épaisseur va en effet, améliorer l'absorption des photons à condition que la longueur de diffusion des porteurs minoritaires soit relativement supérieure à l'épaisseur de la couche. Cet optimum obtenu est donc un compromis entre l'augmentation de l'épaisseur et la longueur de diffusion des porteurs minoritaires. La figure III.18 rapporte la valeur optimale du dopage I qui est de l'ordre de $6.10^{16} cm^{-3}$ pour différentes épaisseurs de couche.

Comme pour la structure Schottky, le principal avantage de la structure MIN est l'absence d'une couche InGaN dopée P très difficile à réaliser. La figure III.19 présente les caractéristiques courant-tension de la cellule solaire Schottky et celles de la structure MIN obtenues avec les paramètres optimaux. Nous pouvons facilement apercevoir que c'est la structure MIN qui présente les meilleures performances avec un rendement optimal de

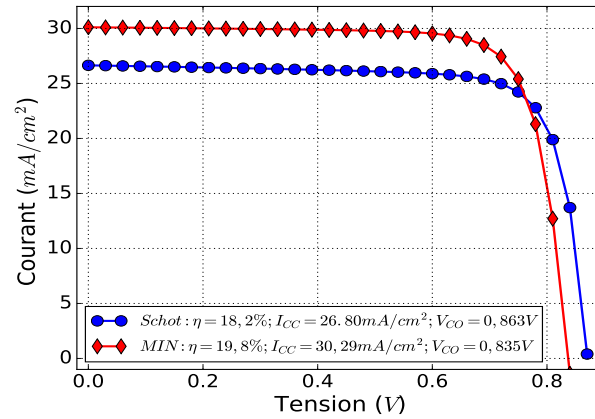


FIGURE III.19 – Caractéristiques courant-tension de la cellule solaire MIN et de la cellule Schottky (Schot) obtenues avec les paramètres optimaux.

19,8% contre 18,2% pour la structure Schottky. Si nous observons de manière plus fines ces performances, nous pouvons constater que la structure MIN possède le meilleur I_{CC} , en revanche, son V_{CO} est légèrement inférieur à celui de la structure Schottky. Ceci est dû à la différence de la composition d'indium : la structure Schottky a une composition d'indium optimale de 0,56, inférieure à la valeur optimale pour la structure MIN (0,6). Ceci induit aussi une différence de la hauteur de barrière. Cette augmentation de la composition d'indium entraîne une diminution du V_{CO} à cause du rétrécissement de l'énergie de la bande interdite et en même temps le I_{CC} augmente en raison de l'amélioration de l'absorption des photons.

L'autre avantage important de la structure MIN par rapport à la structure Schottky repose sur les intervalles de tolérance des différents paramètres optimaux. En effet, il est important pour chaque paramètre optimal, de connaître l'intervalle de tolérance dans lequel il peut varier sans pour autant dégrader les performances de la cellule. Nous avons donc effectué une étude de tolérance sur chaque paramètre optimal qui consistait à définir un intervalle dans lequel le paramètre peut varier tout en gardant le rendement de la cellule à plus de 90% de sa valeur maximale. Les autres paramètres d'optimisation sont, cependant maintenus à leurs valeurs optimales.

Comme le montre le tableau III.6, les intervalles de tolérance des paramètres optimaux de la structure MIN sont plus larges que ceux de la structure Schottky. Ceci est dû à une augmentation des degrés de liberté des paramètres de la structure MIN par la présence de la couche I, qui est très importante pour la fabrication de la cellule. Par exemple,

	$N_i(\text{cm}^{-3})$	$d_i(\mu\text{m})$	$N_d(\text{cm}^{-3})$	$d_n(\mu\text{m})$	x	$W_f(\text{eV})$
Schottky			$6,5 \cdot 10^{16}$ [1,0.10 ¹⁶ – 3,0.10 ¹⁷]	0,86 [0,53 – 1,00]	0,56 [0,50 – 0,72]	6,3 [6,15 – 6,30]
MIN	$6,1 \cdot 10^{16}$ [1,0.10 ¹⁴ – 1,0.10 ¹⁷]	0,61 [0,10 – 1,00]	$3,6 \cdot 10^{17}$ [1,8.10 ¹⁶ – 1,0.10 ¹⁹]	0,83 [0,10 – 1,00]	0,60 [0,48 – 0,72]	6,30 [6,10 – 6,30]

TABLEAU III.6 – Intervalles de tolérance pour chaque paramètre optimal de la cellule solaire. Chaque intervalle correspond à l'ensemble des valeurs que peut prendre le paramètre tout en gardant le rendement de la cellule à plus de 90% de son maximum. Les autres paramètres d'optimisation sont maintenus à leurs valeurs optimales.

pour la structure Schottky, l'intervalle de tolérance de l'épaisseur de la couche N (d_n) est de [0,53 - 1,00] μm , alors que pour la structure MIN, il est de [0,10 - 1,00] μm , c'est ce qui confère à la structure MIN une tolérance de fabrication plus large que la structure Schottky. Pour le dopage N (N_d), la structure Schottky a un intervalle de tolérance de [1,0.10¹⁶ - 3,0.10¹⁷] cm^{-3} , alors que, pour la structure MIN, l'intervalle de tolérance est de [1,8.10¹⁶ - 1,0.10¹⁹] cm^{-3} . Ces forts dopages possibles sur la structure MIN, permettraient d'élaborer directement les contacts ohmiques à très faible résistance sur la couche InGaN [140], l'un des défis majeurs pour la réalisation des cellules solaires à base de nitrure-III [141].

III.2 Les cellules solaires conventionnelles

L'immense majorité de cellules solaires photovoltaïques est réalisée à partir d'une jonction PN ou PIN conventionnelle. Après avoir étudié les performances de nouvelles structures de cellule solaire à base d'InGaN, nous allons ici les comparer avec les structures conventionnelles à base d'InGaN. Par ailleurs l'optimisation de ces dernières et surtout leurs réalisations pratiques est une étape primordiale pour le développement de la prochaine génération de cellules solaires; les cellules solaires multijonctions. Ces structures PN et PIN conventionnelles sont tout simplement les composantes de base des cellules solaires multijonctions à haut rendement [103] que nous verrons dans le chapitre suivant.

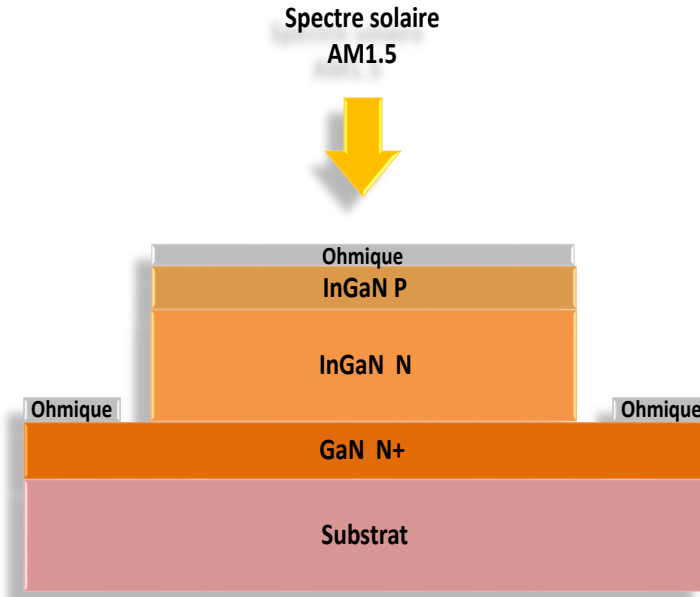


FIGURE III.20 – Cellule solaire PN à base d'InGaN.

III.2.1 L'optimisation des structures PN et PIN

III.2.1.1 La structure PN

La structure modélisée est présentée sur la figure III.20. Elle est composée d'une couche InGaN dopée P et une couche dopée N. Comme toutes les autres structures, elle peut être réalisée en utilisant une couche tampon de GaN fortement dopée N entre le substrat et la cellule [32, 33].

Nous avons pour cette structure, optimisé simultanément cinq paramètres pertinents de la structure : les concentrations de dopage de la couche P (N_a) et de la couche N (N_d), les épaisseurs de couche (d_p , d_n) et la composition d'indium (x) qui est la même partout. L'InGaN étant très absorbant, avec un coefficient d'absorption extrêmement élevé de l'ordre de, 10^5cm^{-1} [142], une très fine couche P est suffisante pour absorber une grande part du spectre solaire. Nous avons donc autorisé l'épaisseur de la couche P entre 0,01 et 0,10 μm : $d_p \in [0,01 - 0,10] \mu\text{m}$. Pour les autres paramètres, nous avons considéré les mêmes intervalles d'optimisation que ceux définis pour l'optimisation des structures précédentes (voir tableau III.7).

Après l'optimisation de la structure, nous obtenons un rendement optimal de la cellule de 17,8% avec les paramètres d'optimisation suivant :

Paramètres d'optimisation	$N_a(cm^{-3})$	$d_p(\mu m)$	$N_d(cm^{-3})$	$d_n(\mu m)$	x
Intervalles d'optimisation	$[10^{16} - 10^{19}]$	$[0,01 - 0,10]$	$[10^{16} - 10^{19}]$	$[0,1 - 1,0]$	$[0 - 1]$
Paramètres optimaux	$1,0.10^{19}$	0,01	$3,9.10^{16}$	1,00	0,56
Paramètres significatifs de la cellule	$V_{CO}(V)$		$I_{CC}(mA/cm^2)$	FF(%)	$\eta(\%)$
	0,855		26,75	77,85	17,8

TABLEAU III.7 – Les paramètres et intervalles d'optimisation, les paramètres optimaux et les paramètres significatifs de la cellule solaire PN. V_{CO} est la tension de circuit ouvert, I_{CC} , le courant de court-circuit et FF, le facteur de remplissage.

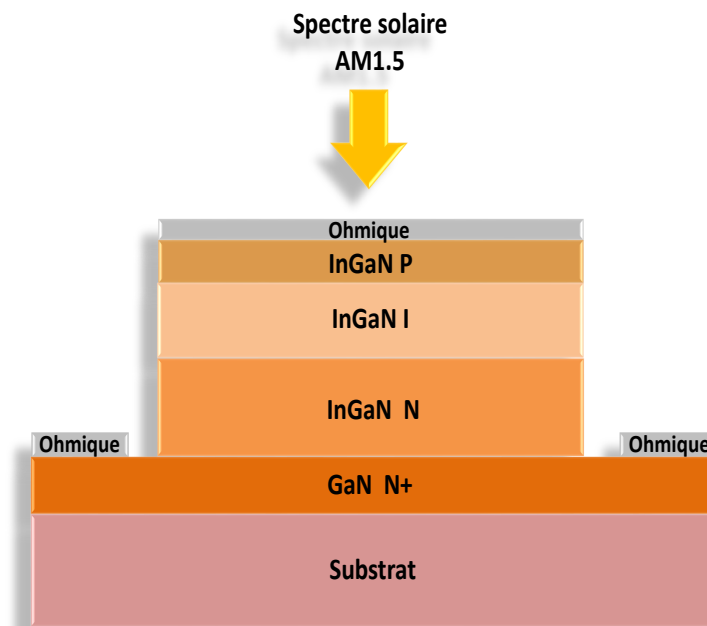


FIGURE III.21 – Cellule solaire PIN à base d'InGaN.

$(N_a; d_p; N_d; d_n; x) = (1,0.10^{19}cm^{-3}; 0,01\mu m; 3,9.10^{16}cm^{-3}; 1,00\mu m; 0,56)$, regroupés avec les paramètres significatifs de la cellule dans le tableau III.7.

III.2.1.2 La structure PIN

La structure étudiée est présente sur la figure III.21, nous pouvons observer qu'elle se différencie de la structure PN par une couche InGaN supplémentaire (intrinsèque) pris en sandwich entre la couche P et la couche N. Le nombre de paramètres d'optimisation est donc plus élevé que pour la structure PN. Nous avons optimisé simultanément sept paramètres de la structure : les épaisseurs des différentes couches, leurs dopages et la composition d'indium. Leurs intervalles d'optimisation sont regroupés dans le tableau III.8.

Paramètres d'optimisation	$N_a(cm^{-3})$	$d_p(\mu m)$	$N_i(cm^{-3})$	$d_i(\mu m)$	$N_d(cm^{-3})$	$d_n(\mu m)$	x
Intervalles d'optimisation	$[10^{16} - 10^{19}]$	$[0,01 - 0,10]$	$[10^{16} - 10^{19}]$	$[0,01 - 0,10]$	$[10^{16} - 10^{19}]$	$[0,1 - 1,0]$	$[0 - 1]$
Valeurs optimaux	$1,0 \cdot 10^{19}$	0,01	$5,8 \cdot 10^{16}$	0,54	$5,0 \cdot 10^{17}$	0,50	0,59
Paramètres significatifs de la cellule				$V_{CO}(V)$	$I_{CC}(mA/cm^2)$	FF(%)	$\eta(\%)$
				0,875	27,36	79,39	19,0

TABLEAU III.8 – Les intervalles d'optimisation et les paramètres optimaux ainsi que les performances de la cellule solaire PIN.

Le programme d'optimisation a fourni le septuplet optimal suivant : $(N_a; d_p; N_i; d_i; N_d; d_n; x) = (1,0 \cdot 10^{19} cm^{-3}; 0,01 \mu m; 5,8 \cdot 10^{16} cm^{-3}; 0,54 \mu m; 5,0 \cdot 10^{17} cm^{-3}; 0,50 \mu m; 0,59)$, avec un rendement optimal de la cellule de 19,0%. Ces valeurs ainsi que celles des paramètres significatifs de la cellule sont regroupées dans le tableau III.8.

III.2.2 Comparaisons des performances

III.2.2.1 Comparaison entre la structure PN et PIN

Nous avons présenté sur la figure III.22, les caractéristiques courant-tension de deux structures obtenues avec les paramètres optimaux. Nous constatons que l'on obtient avec la structure PIN, des performances légèrement supérieures à celles obtenues dans la structure PN, avec un rendement de 19,0% pour la PIN contre 17,8% pour la PN. L'écart de performance entre les structures s'explique par le fait fait que l'on ait, pour la structure PIN, un I_{CC} et un V_{CO} un peu plus élevés que pour la structure PN. En effet, comme pour la structure MIN, la couche intrinsèque de la structure PIN permet d'avoir une plus grande ZCE et améliorer ainsi la génération des paires électron-trou. L'augmentation du I_{CC} est donc due à l'augmentation de la concentration des porteurs photogénérés et celle du V_{CO} à l'augmentation de la largeur de la ZCE. En outre, nous avons également réalisé une étude de tolérance sur tous les paramètres optimaux de deux structures; rapportée dans le tableau III.9. On voit dans ce tableau, que les plages de tolérance pour le dopage et l'épaisseur de la couche N sont plus larges dans la structure PIN que dans la structure PN. Ce qui confère à la structure PIN un avantage supplémentaire considérable pour la réalisation pratique de la cellule. Pour l'épaisseur de la couche N, la structure PIN possède un intervalle de tolérance de $[0,01 - 1,00] \mu m$, presque deux fois plus large que celui de la structure PN ($[0,48 - 1,00] \mu m$). Pour le dopage, la structure PIN permet de réaliser des forts dopages sur la couche N, jusqu'à $1,0 \cdot 10^{19} cm^{-3}$, sans modifier, de manière considé-

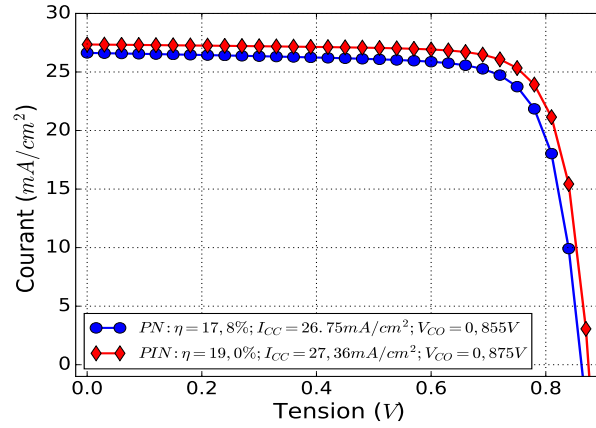


FIGURE III.22 – Caractéristiques courant-tension de la cellule solaire PN et de la cellule PIN obtenues avec les paramètres optimaux.

	$N_a(cm^{-3})$	$d_p(\mu m)$	$N_i(cm^{-3})$	$d_i(\mu m)$	$N_d(cm^{-3})$	$d_n(\mu m)$	x
PN	$1,0.10^{19}$ [$4,4.10^{16} - 1,0.10^{19}$]	0,01 [0,01 – 0,04]			$3,9.10^{16}$ [$1,0.10^{16} - 3,5.10^{17}$]	1,00 [0,48 – 1,00]	0,56 [0,50 – 0,72]
PIN	$1,0.10^{19}$ [$5,9.10^{16} - 1,0.10^{19}$]	0,01 [0,01 – 0,04]	$5,8.10^{16}$ [$1,0.10^{14} - 1,0.10^{17}$]	0,54 [0,18 – 1,00]	$5,0.10^{17}$ [$1,9.10^{16} - 1,0.10^{19}$]	0,50 [0,10 – 1,00]	0,59 [0,47 – 0,71]

TABEAU III.9 – Intervalles de tolérance pour chaque paramètre optimal de la cellule solaire. Chaque intervalle correspond à l'ensemble des valeurs que peut prendre le paramètre tout en gardant le rendement de la cellule à plus de 90% de son maximum. Les autres paramètres d'optimisation sont maintenus à leurs valeurs optimales.

nable les performances de la cellule et facilitant ainsi la réalisation de contacts ohmiques au niveau de cette couche [140].

III.2.2.2 Comparaison des structures Schottky avec les structures PN/PIN

Les cellules solaires Schottky et MIN à base d'InGaN ont montré des résultats très encourageants pour le développement de la technologie de cellules solaires photovoltaïques à base d'InGaN. Cette étude a surtout permis de montrer que les difficultés liées à l'élaboration d'une couche InGaN dopée P peuvent être évitées. En effet, nous avons montré que les structures sans couche P (Schottky et MIN) présentent des performances légèrement supérieures à leur équivalent avec couche P (PN et PIN). Les structures PN et PIN présentent respectivement, des rendements optimaux de 17,8% et 19,0% alors que pour les structures Schottky et MIN, nous avons obtenu des rendements optimaux de 18,2% et 19,8% respectivement. Les structures Schottky et MIN présentent donc de très bonnes alternatives aux structures PN et PIN conventionnelles. Nous avons aussi observé que, comparée à la structure Schottky, la structure MIN offre une plus large marge de tolé-

rance sur ses paramètres physiques et géométriques, facilitant par conséquent, la faisabilité technologique de la cellule solaire.

L'étude de ces structures simple-jonction est essentielle, car ce sont les briques de base pour le développement des structures de cellule solaire multijonction. En effet, l'étude du matériau InGa_N pour le photovoltaïque est particulièrement orientée pour la réalisation des cellules multijonctions haut rendement que nous aborderons dans le chapitre suivant.

III.3 Réalisation technologique

III.3.1 Limites des performances des cellules InGa_N

III.3.1.1 Limites en teneur d'indium

Dans les sections précédentes, nous avons optimisé les structures de cellules solaires à base d'InGa_N sans tenir compte des limites technologiques actuelles. La principale limite de cette technologie aujourd'hui est la teneur en indium des couches InGa_N. On a vu que le rendement optimal des cellules solaires est obtenu par des teneurs élevées en indium. Cependant, il est très difficile de faire croître une couche d'InGa_N épaisse de haute qualité à forte teneur en Indium. D'autre part, le désaccord de paramètre de maille entre l'InGa_N et les substrats utilisés est important, ce qui provoque une distorsion de la maille cristalline, générant ainsi des contraintes internes. Lorsque l'énergie de déformation de la couche d'InGa_N épitaxiée devient très importante, pour une épaisseur donnée dite "critique", les contraintes se relaxent provoquant la formation de dislocations. Il est alors très difficile de réaliser des cellules solaires à base d'InGa_N à forte teneur d'indium et avec des épaisseurs de couche aussi élevées. Nous allons donc étudier dans cette partie, les rendements optimaux des cellules solaires que l'on peut obtenir en tenant compte des limites en teneur d'indium et en épaisseur de couche.

Une étude d'une cellule solaire hétérojonction à structure PIN réalisé par Fabien et al. [143] montre la faisabilité d'une cellule solaire avec une couche d'InGa_N contenant une composition d'indium de 0,22 avec une épaisseur de couche variant entre 50 et 200 nm. Nous avons donc réévalué l'optimum des structures de cellules solaires en considérant cette composition d'indium de 0,22 et une épaisseur maximale de la couche InGa_N de

Performances	$V_{CO}(V)$	$I_{CC}(mA_c m^2)$	FF(%)	$\eta(\%)$
Structure PN	1,88	3,31	80,2	5,01
Structure Schottky	1,50	7,38	82,27	9,16

TABEAU III.10 – Performances des cellules solaires PN et Schottky avec une composition indium de 0,22 et une épaisseur de couche InGaN de 200 nm.

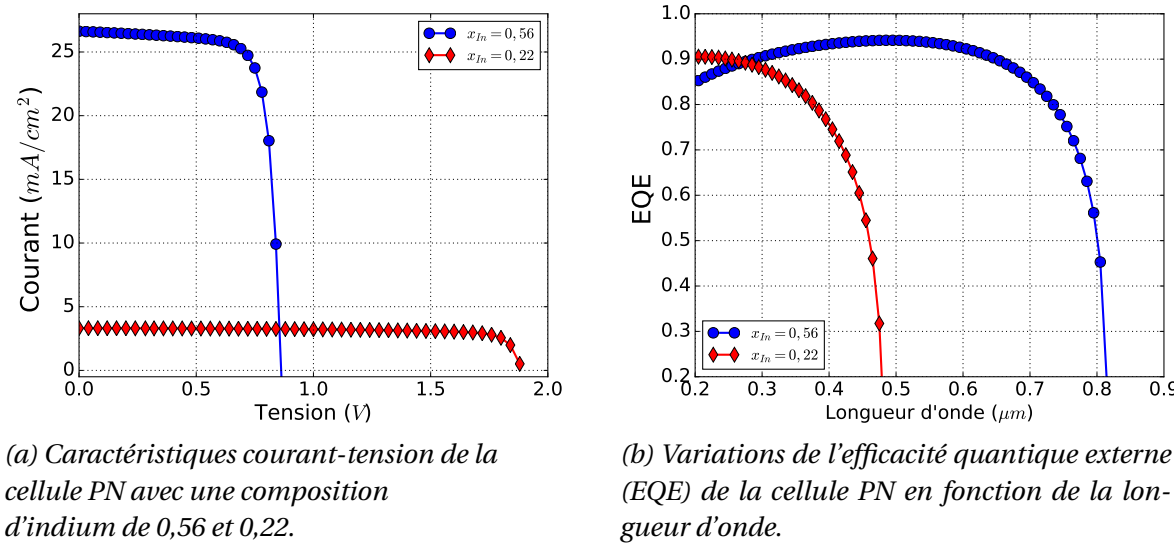
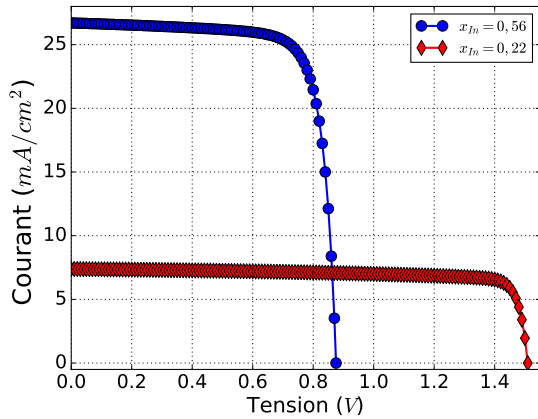


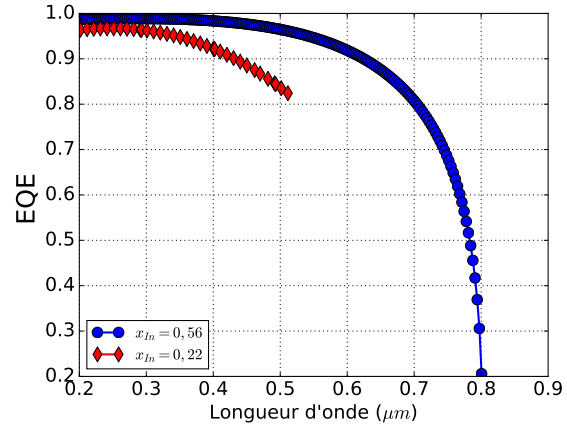
FIGURE III.23 – Comparaison des performances de la cellule solaire PN : $x_{In} = 0,56$, correspond à la composition d'indium sans contraintes technologiques et $x_{In} = 0,22$, correspond à la composition d'indium pour une optimisation avec une épaisseur de couche InGaN de 200 nm.

200 nm.

Par exemple, pour les structures PN et Schottky, les performances optimales obtenues sont regroupées sur le tableau III.10. On remarque une diminution des performances, la structure PN présente cette fois-ci un rendement optimal de 5,0 % et la structure Schottky présente un rendement optimal de 9,1 %. Cette diminution est principalement due à la diminution du courant de court-circuit, I_{CC} comme on le voit sur les figures III.23 III.24. L'augmentation en même temps de la tension de circuit ouvert, V_{CO} ne permet pas de compenser cette diminution. Une diminution de la composition d'indium entraîne une augmentation de la bande d'énergie interdite, E_g . La diminution du I_{CC} est donc due à la modification du spectre d'absorption de la cellule. En effet, avec E_g plus grand, les cellules n'absorbent que les photons les plus énergiques, les photons à faible énergie ne seront pas absorbés. Sur la figure III.23b, pour la structure PN et sur la figure III.24b, pour la structure



(a) Caractéristiques courant-tension de la cellule Schottky avec une composition d'indium de 0,56 et 0,22.



(b) Variations de l'efficacité quantique externe (EQE) de la cellule Schottky en fonction de la longueur d'onde.

FIGURE III.24 – Comparaison des performances de la cellule solaire Schottky : $x_{In} = 0,56$ correspond à la composition d'indium obtenu sans contraintes technologiques et $x_{In} = 0,22$ correspond à la composition d'indium pour une optimisation avec une épaisseur de couche InGaN de 200 nm.

Schottky, nous avons présenté la variation de l'efficacité quantique externe (EQE)¹ en fonction de la longueur d'onde. On voit que pour une composition d'indium $x_{In} = 0,22$, les cellules n'absorbent que les photons ayant une longueur d'onde inférieure à $0,5\mu\text{m}$ alors que, pour $x_{In} = 0,56$ les cellules absorbent sur une plage de longueur d'onde plus large.

III.3.1.2 Impact des défauts structuraux

Comme nous l'avons vu dans le premier chapitre, les couches InGaN présentent une quantité importante de défauts structuraux, notamment, les lacunes d'azote, V_N qui sont de type N. Nous avons donc introduit une concentration de défauts dans le matériau InGaN et avons étudié son influence sur les performances de la cellule solaire. Sur la figure III.25, nous avons présenté la variation du rendement de la cellule PN en fonction de la concentration de défauts. Nous remarquons que l'augmentation de cette concentration entraîne une diminution du rendement. Ces défauts ont surtout un rôle de compensation de l'activité électrique des dopants de type accepteur.

Sur le tableau III.11 nous avons présenté l'évolution du rendement de la cellule PN, lorsqu'on tient compte des limites technologiques actuelles. Lorsqu'on ne tient pas compte de la limite en teneur d'indium actuelle, la structure PN présente un rendement optimal

1. EQE (External Quantum Efficiency) : Rapport du nombre des porteurs photogénérés collectés sur le nombre de photons incidents.

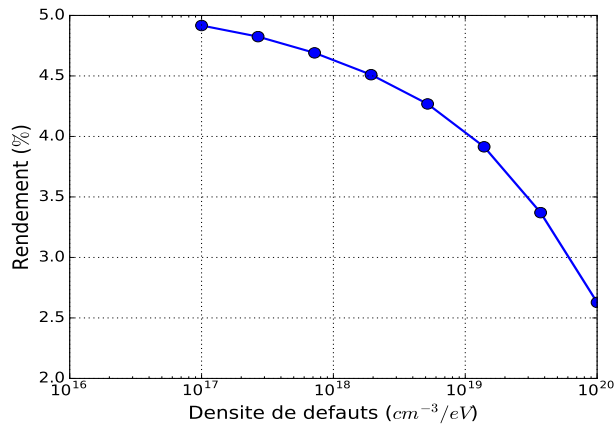


FIGURE III.25 – Variation du rendement de la cellule PN en fonction de la concentration de défauts de type donneur.

Structure PN		
Sans contraintes technologiques	$x = 0,56$ $T = 1,0\mu m$	$\eta = 17,8\%$
Avec contraintes liées à la composition d'indium	$x = 0,22$ $T = 0,2\mu m$	$\eta = 5,01\%$
Avec les défauts structuraux	$x = 0,22$ $T = 0,2\mu m$ $N = 3,72.10^{19}cm^{-3}$	$\eta = 3,37\%$

TABEAU III.11 – Performances de la cellule PN avec et sans contraintes technologiques. x est la composition d'indium, T représente l'épaisseur de la couche InGaN et N la concentration de défauts structuraux.

de 17,8%. Le rendement diminue ensuite considérablement et passe de 17,8% à 5,01% lorsqu'on limite la composition d'indium à 0,22 avec une épaisseur de couche de 200nm. En considérant en plus, les défauts structuraux dans le matériau, la cellule ne présente que 3,37% de rendement. On arrive donc ici à retrouver et expliquer théoriquement les rendements expérimentaux obtenus actuellement pour une structure simple à base d'InGaN, en intégrant les contraintes réalistes dans les simulations.

L'incorporation actuelle d'indium dans InGaN est donc évidemment trop faible pour réaliser des cellules solaires à haute performance. Par ailleurs, on remarque que par rapport aux contraintes technologiques, la structure Schottky présente toujours des performances sensiblement meilleures que celle de la structure PN. Il reste néanmoins un tra-

vail très important à faire afin d'augmenter l'incorporation d'indium dans InGaN. Plusieurs études ont déjà été réalisées pour l'élaboration de couches InGaN à forte concentration d'indium, notamment grâce à des structures à puits quantiques InGaN/GaN qui permettent une incorporation d'indium dépassant les 0,3 [71, 144]. Concernant la présence des défauts natifs, il faut absolument que leur concentration soit inférieure à celle des dopants de type accepteur.

Avec ou sans couche P, la réalisation des structures à simple-jonction se heurte actuellement au besoin d'un substrat adapté pour la croissance épitaxiale et à une faible incorporation d'indium. Nous allons voir ici, l'impact des différentes contraintes, notamment celles liées à la couche P, aux faibles incorporations d'indium et aux défauts structuraux.

III.3.2 L'impact de la couche P

Comme nous l'avons déjà indiqué, l'élaboration d'une couche InGaN de type P avec une qualité cristalline satisfaisante, reste toujours difficile à réaliser. C'est l'un des défis majeurs pour la réalisation de structures de cellules solaires à base d'InGaN. Bien que nous ayons montré que certaines structures peuvent efficacement se passer de la couche P, d'autres structures, comme les multijonctions, ne permettront pas de remplacer toutes les couches P. Nous allons donc ici, étudier l'impact des paramètres liés à la couche P, à savoir son dopage et son épaisseur.

Les figures III.26 et III.27 présentent les variations des rendements de la cellule PN et PIN en fonction du dopage P pour différentes épaisseurs de couche (couche P). Ces courbes montrent que pour une épaisseur donnée, le rendement présente un maximum qui évolue avec le dopage. En effet, l'augmentation du dopage, accroît de manière évidente, le champ électrique dans la jonction et entraîne en même temps une diminution de la zone de charge d'espace (ZCE). L'augmentation du champ électrique va entraîner un accroissement du V_{CO} , en revanche, la diminution de la ZCE va entraîner une diminution du I_{CC} . Ces deux tendances opposées du V_{CO} et du I_{CC} vont par conséquent donner ces rendements maximums en fonction du dopage et de l'épaisseur de la couche P.

III.3.2.1 Variation du dopage P

Dans un premier temps, nous avons regardé la variation du dopage P optimal en fonction de l'épaisseur de la couche P pour les deux structures PN et PIN (figure III.28

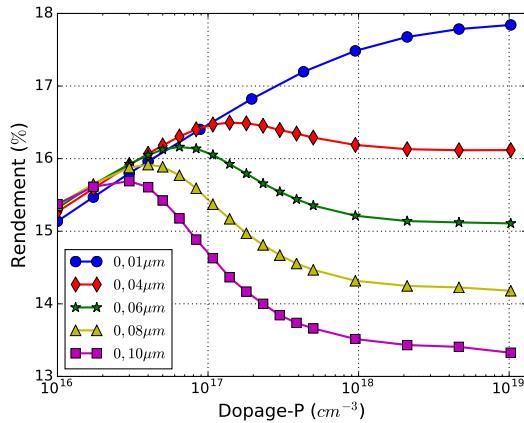


FIGURE III.26 – Variation du rendement de la cellule PN en fonction du dopage de la couche P pour différentes épaisseurs. Les autres paramètres d'optimisation sont maintenus à leurs valeurs optimales.

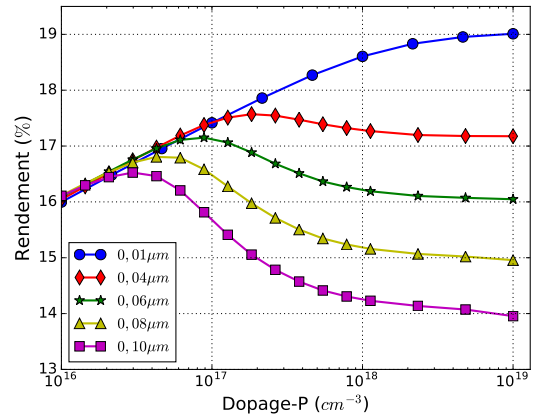


FIGURE III.27 – Variation du rendement de la cellule PIN en fonction du dopage de la couche P pour différentes épaisseurs. Les autres paramètres d'optimisation sont maintenus à leurs valeurs optimales.

et figure III.29). On voit que le rendement augmente avec la diminution de l'épaisseur de la couche P. Pour la structure PN, le rendement de la cellule passe de 15,6% à 17,8% lorsque l'on fait varier l'épaisseur de 0,10µm à 0,01µm. La durée de vie des porteurs dans la couche d'InGaN est considérée constante et égale à une nanoseconde. Pour la structure PIN, le rendement de la cellule varie de 16,5% à 19,0% lorsque l'on fait varier l'épaisseur de 0,10µm à 0,01µm. Ceci montre que même si l'épaisseur de la couche P optimale des deux structures est très faible, le rendement de la cellule reste relativement élevé sur une large plage d'épaisseur. Également, pour le dopage P, on peut voir qu'il peut varier sur une très large plage sans pour autant modifier considérablement le rendement de la cellule solaire, grâce à l'inclusion de la couche I. Comme nous l'avons souligné précédemment, ce point concernant les plages de tolérance est très important pour la réalisation pratique des structures de cellule solaire.

III.3.2.2 Évolution des caractéristiques courant-tension

La figure III.30, pour la structure PN et la figure III.31, pour la structure PIN représentent les caractéristiques courant-tension pour trois couples de points optimaux (épaisseur P, dopage P) : (0,10µm, $1.10^{16} \text{ cm}^{-3}$), (0,04µm, $1.3.10^{17} \text{ cm}^{-3}$), (0,01µm, $1.10^{19} \text{ cm}^{-3}$). On peut remarquer que pour ces trois points le rendement ne varie pas énormément. Par exemple, pour la structure PN, le point (0,04µm, $1.3.10^{17} \text{ cm}^{-3}$) conduit à un rendement optimal de 16,4 %, relativement proche des 17,8 % obtenu avec le point optimal (0,01µm,

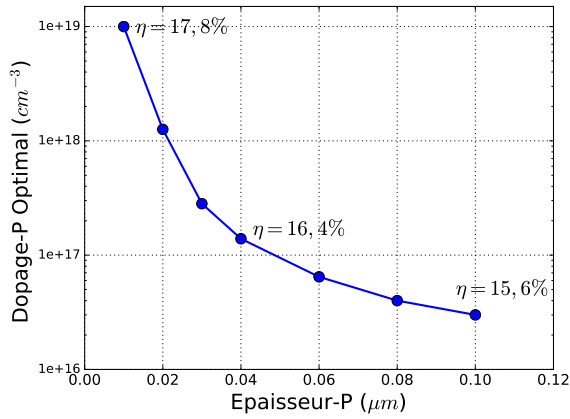


FIGURE III.28 – Variation du dopage optimal de la couche P en fonction de son épaisseur pour la cellule solaire PN. Le rendement optimal correspondant à certains points a été mentionné sur la figure.

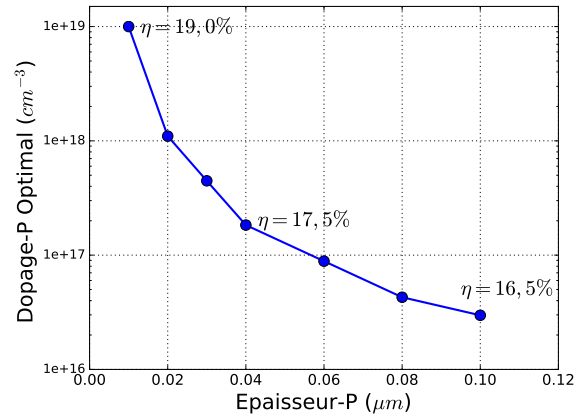


FIGURE III.29 – Variation du dopage optimal de la couche P en fonction de son épaisseur pour la cellule solaire PIN. Le rendement optimal correspondant à certains points a été mentionné sur la figure.

$1,0 \cdot 10^{19} \text{cm}^{-3}$). Par ailleurs, les figures III.26 et III.27 montrent que la variation du rendement en fonction du dopage de la couche P pour différentes épaisseurs est principalement due aux variations du V_{CO} , car le I_{CC} reste constant. L'augmentation du V_{CO} est dû à l'augmentation du dopage. Le I_{CC} reste constant en raison de l'augmentation du dopage et de la diminution en même temps de l'épaisseur de la couche P. En effet, l'augmentation du dopage entraîne une diminution du I_{CC} alors que la diminution de l'épaisseur entraîne une augmentation du I_{CC} .

Ces résultats montrent que les performances optimales des structures PN et PIN sont obtenues pour une couche P relativement mince (10 nm) avec une valeur du dopage P élevée de $1,0 \cdot 10^{19} \text{cm}^{-3}$. La zone de charge d'espace s'étend donc principalement du côté de la couche I pour la structure PIN et du côté de la couche N pour la structure PN. On a donc une configuration de la zone de charge d'espace similaire aux structures sans couche P (Schottky, MIN). En outre, cette épaisseur optimale est beaucoup plus faible que la profondeur de pénétration optique et la longueur de diffusion des porteurs minoritaires dans InGaN [145]. Nous pouvons donc considérer, comme cela a été montré précédemment, qu'on pourrait très bien se passer de la couche P pour la réalisation de structure de cellules solaires PN et PIN à base d'InGaN en optant pour les structures Schottky et MIN. Ce qui éviterait les difficultés liées à l'élaboration de la couche P. Pour ce faire, cependant, le contact Schottky doit être réalisé avec un métal à fort travail de sortie.

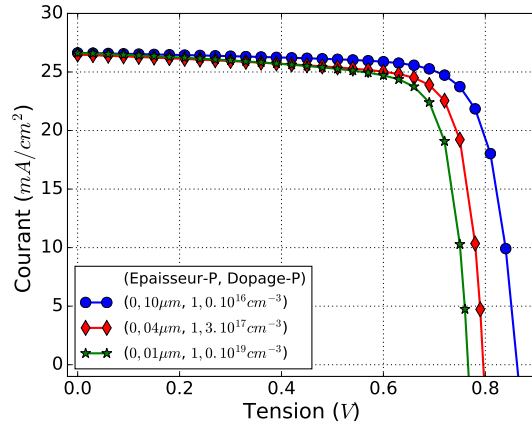


FIGURE III.30 – Caractéristiques courant-tension de la cellule solaire PN pour différents couples de points optimaux (Épaisseur-P, Dopage-P). Les autres paramètres d'optimisation sont maintenus à leurs valeurs optimales.

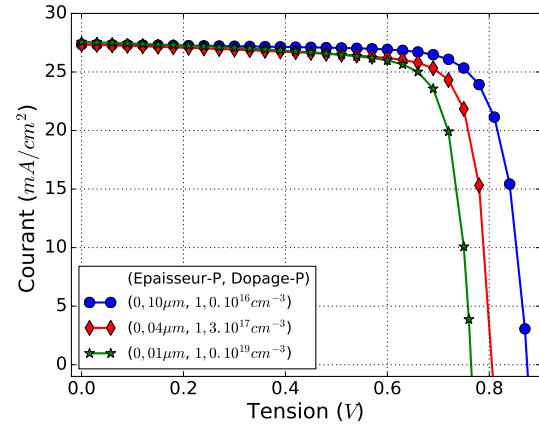


FIGURE III.31 – Caractéristiques courant-tension de la cellule solaire PIN pour différents couples de points optimaux (Épaisseur-P, Dopage-P). Les autres paramètres d'optimisation sont maintenus à leurs valeurs optimales.

Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons présenté les performances de structures de cellules solaires à base d'InGaN. Nous avons montré que les nouvelles structures sans couche P, que nous proposons, permettraient d'éviter les difficultés liées à l'élaboration de cette couche et présentent des performances légèrement meilleures que leurs équivalents avec couche P. Nous avons montré également, que les paramètres de la structure MIN possèdent des intervalles de tolérances plus larges, ce qui la rend particulièrement intéressante par rapport aux contraintes technologiques actuelles. En outre, nous avons vu que l'optimum de la composition d'indium pour ces structures se situe entre 0,55 et 0,60. Cependant, l'incorporation d'une telle quantité d'indium est très difficile à réaliser actuellement. Nous avons donc réoptimisé la structure PN et Schottky, en considérant les limites technologiques actuelles. Nous avons alors montré pour la première fois à notre connaissance, une simulation du rendement des cellules solaires qui correspond aux résultats expérimentaux obtenus par d'autres équipes, expliquant par là l'origine physique de ces faibles performances.

IV

Modélisation et optimisation de structures complexes

Sommaire

IV.1 Cellules photovoltaïques à multijonction	110
IV.1.1 Modélisation d'une multijonction	110
IV.1.2 Performances des cellules solaires multijonctions	113
IV.2 Optimisation d'une double-jonction	116
IV.2.1 Description de la structure	116
IV.2.2 Les performances de la cellule solaire	119
IV.2.3 Comparaison du résultat à la littérature	122
IV.3 Contraintes technologiques	122
IV.3.1 Phénomènes de polarisation	122
IV.3.2 Défauts structuraux	127
IV.3.3 Qualité des interfaces	133

IV.1 Cellules photovoltaïques à multijonction

Les cellules solaires monojonction étudiées dans le chapitre précédent ne permettent pas d'exploiter au mieux le spectre solaire : une partie de ce dernier ne participe pas à la création des paires électron-trou. En effet, seuls les photons dont l'énergie est supérieure ou égale à la bande d'énergie interdite (gap) du matériau sont utiles pour la génération des paires électron-trou. Les photons ayant une énergie inférieure à celle du gap traversent le matériau sans être absorbés et l'excès d'énergie apportée par les photons ayant une énergie supérieur à celle du gap est dissipé sous forme de chaleur par thermalisation dans le matériau. En d'autres termes, la réponse photovoltaïque d'une cellule monojonction n'est pas optimale. Ainsi, une des solutions envisagées pour limiter ces pertes de photons consiste à concevoir des cellules solaires comportant plusieurs jonctions possédant chacune un gap différent, permettant ainsi d'absorber progressivement le spectre solaire à partir des courtes longueurs d'onde vers les plus longues [83]. Ces cellules font partie de la troisième génération des technologies photovoltaïques et actuellement, ce sont elles qui détiennent les records de rendement de conversion [3]. Nous allons donc voir dans ce dernier chapitre, l'étude d'une structure de cellule solaire multijonction. Dans cette étude, nous nous intéressons à la cellule à base d'InGaN dont on cherche à connaître les performances et à discuter de certains effets susceptibles de dégrader ces performances, tels que la polarisation et les défauts structuraux du matériau InGaN.

IV.1.1 Modélisation d'une multijonction

IV.1.1.1 Architecture de la cellule multijonction

Les cellules solaires multijonctions sont une technologie qui permet d'optimiser l'absorption du spectre solaire. Pour cela, il faut faire en sorte que les différentes jonctions absorbent chacune une partie du spectre solaire. Plusieurs jonctions PN possédant des bandes d'énergie interdites différentes sont donc superposées pour former la cellule multijonction. La première sous-cellule (Sous-cellule 1) est optimisée pour avoir une bande d'énergie interdite (E_{G1}) absorbant les photons de fortes énergies. La seconde (Sous-cellule 2) avec une bande d'énergie interdite (E_{G2}) est optimisée pour absorber des photons moins énergétiques, et ainsi de suite (voir figure IV.1). Ainsi, l'on a : $E_{G1} > E_{G2} > E_{G3}$.

Les cellules multijonctions sont la plupart du temps, conçues à partir de matériaux III-

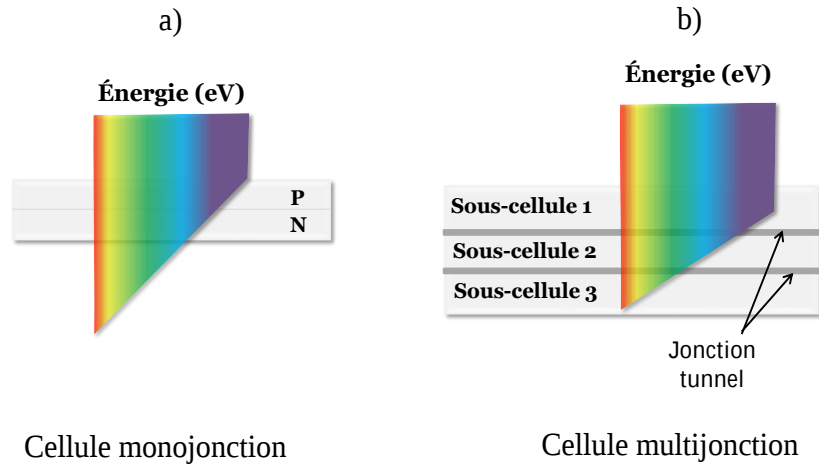


FIGURE IV.1 – Absorption des rayonnements solaires par une cellule monojonction (a) et par une cellule multijonction (b).

V (alliage d'éléments de la colonne III et V du tableau périodique) et sont généralement élaborées par MOVPE [146]. Ces composés III-V et leurs alliages ternaires et quaternaires offrent une multitude de largeurs de gap allant de 0,7 eV (gap de InN) à 6,2 eV (gap de AlN), permettant ainsi de couvrir une très grande partie du spectre solaire [147]. Le plus souvent, ces cellules sont composées de trois à quatre jonctions. Cependant, il faudrait idéalement un très grand nombre de jonctions afin d'optimiser au mieux l'absorption du spectre solaire. De plus, pour ces cellules, une forte concentration du rayonnement solaire permet d'augmenter le rendement de la cellule. Ainsi, le record du monde est actuellement détenu par le laboratoire CEA-Leti (France) en collaboration avec Soitec (France) et l'institut Fraunhofer (Allemagne) avec un rendement de 46%. C'est une cellule à quatre jonctions en GaInAsP/GaInAs de 0.052 cm^2 pour un facteur de concentration de 508 « soleils » [3].

Nous nous intéressons ici, exclusivement aux cellules solaires à base d'InGaN qui permettent de faire varier la bande d'énergie interdite entre 0,7 eV (gap de InN) à 3,42 eV (gap de GaN) simplement en changeant la composition d'indium (x) dans $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$. Ainsi, avec un même matériau, on a la possibilité d'avoir plusieurs jonctions ayant des bandes d'énergie interdite différentes, ce qui facilite la conception de la cellule, car le désaccord de maille entre les différentes jonctions est faible. Chaque jonction est une sous-cellule composée d'une jonction PN avec une composition d'indium donnée : x_1 pour la sous-cellule 1, x_2 pour la sous-cellule 2 et x_3 pour la sous-cellule 3. La figure IV.2, présente l'absorption du spectre solaire pour une cellule monojonction qui n'absorbe qu'une seule

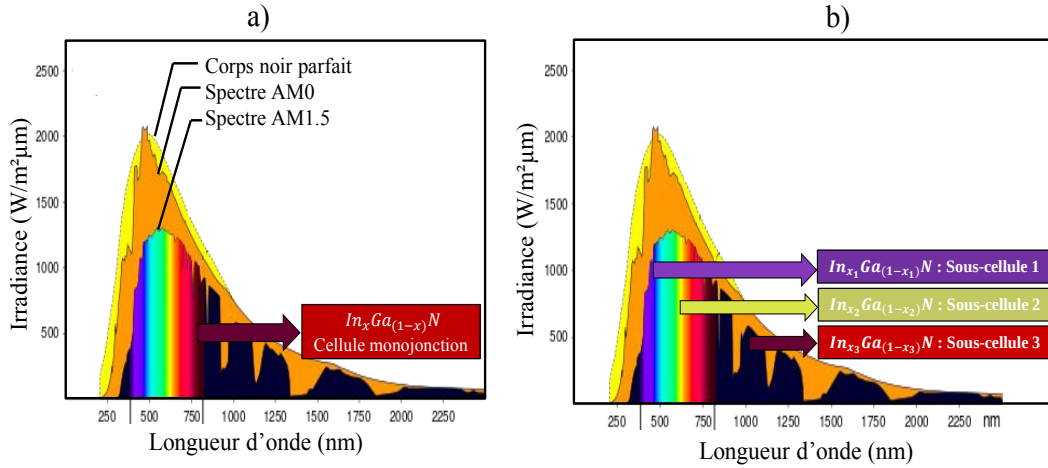


FIGURE IV.2 – Spectre solaire et les parties du spectre qui peuvent, en théorie, être utilisées par une cellule solaires monojonction (a) et par une cellule multijonction (b). AM0 correspond aux rayonnements solaires hors atmosphère et AM1.5 aux rayonnements solaires terrestres.

partie du spectre solaire (a), et l'absorption du spectre pour une cellule multijonction (triple jonction) qui absorbe trois différentes parties du spectre (b).

IV.1.1.2 Mécanisme de transport de charges

L'interconnexion électrique des différentes sous-cellules est déterminante pour optimiser les performances de la cellule. Pour cela, les sous-cellules sont connectées électriquement en série via des jonctions tunnels comme le montre la figure IV.3. Le passage du courant entre les sous-cellules se fait donc par effet tunnel. En effet, sans ces jonctions tunnels, il y aura l'apparition des jonctions NP entre les sous-cellules qui vont s'opposer au passage des porteurs des charges. Ces jonctions tunnels sont également des jonctions PN à base d'InGa_N disposées de manière inverse par rapport aux jonctions destinées à la production du photocourant [148].

Pour obtenir l'effet tunnel, les épaisseurs de couches formant la jonction tunnel, doivent être très fines et fortement dopées ($P^{++}N^{++}$). Dans ces conditions, le niveau de Fermi se situe dans la bande de conduction du côté N et dans la bande de valence du côté P et l'épaisseur de ZCE se trouve très réduite. Les porteurs de charges (électrons et trous) peuvent ainsi traverser la barrière de potentiel par effet tunnel pour passer d'une sous-cellule à une autre (voir figure IV.4). Par ailleurs, les sous-cellules étant connectées en série, le courant fourni par la cellule sera limité au plus faible des courants fournis par les sous-cellules. En outre, la tension aux bornes de la cellule va correspondre à la somme

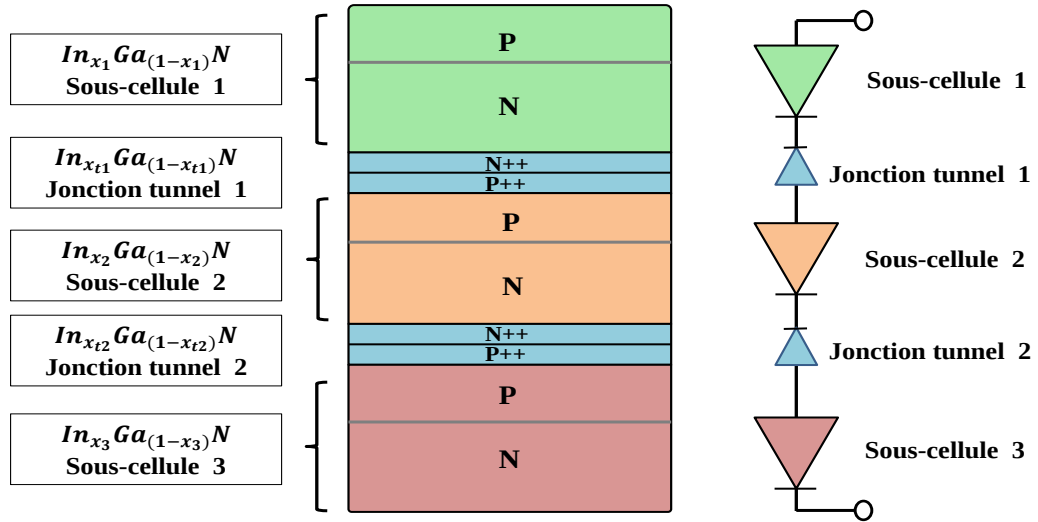


FIGURE IV.3 – Schéma d'une cellule solaire triple jonction et son circuit électrique équivalent avec les diodes représentant les sous-cellules et les jonctions tunnels.

des tensions aux bornes des sous-cellules. Ceci est illustré dans la Figure IV.5 (qui représente les différentes courbes courant-tension des photodiodes constituant une cellule triple jonction).

IV.1.2 Performances des cellules solaires multijonctions

Les recherches actuelles sur les cellules solaires multijonctions III-V poursuivent essentiellement deux buts : l'augmentation du rendement de conversion et la baisse des coûts de fabrication des cellules. Aujourd'hui, le marché des cellules photovoltaïques est dominé par la technologie monojonction à base silicium, caractérisée par des couches épaisses (environ 200 μm d'épaisseur) et avec des rendements qui ont presque atteint leurs limites théoriques qui est de l'ordre de 28 % [149]. La technologie III-V est à base de couches minces et permet non seulement de dépasser cette limite de rendement, mais aussi d'utiliser moins de matériau pour la réalisation de la cellule. Une étude de simulation réalisée par Bremner et al. [150] a montré que sous éclairement AM1.5, une cellule triple jonction pourrait avoir un rendement maximal de 51,58%. Le tableau IV.1 regroupe les valeurs théoriques des rendements maximaux qu'ils ont obtenus pour des cellules multijonctions comportant entre 1 et 8 sous-cellules sous éclairement AM1.5.

Les cellules multijonctions permettent donc d'avoir des cellules plus performantes que les cellules traditionnelles. Cependant, leur fabrication reste complexe et très coûteuse. Elles sont aujourd'hui essentiellement limitées aux applications spatiales telles que

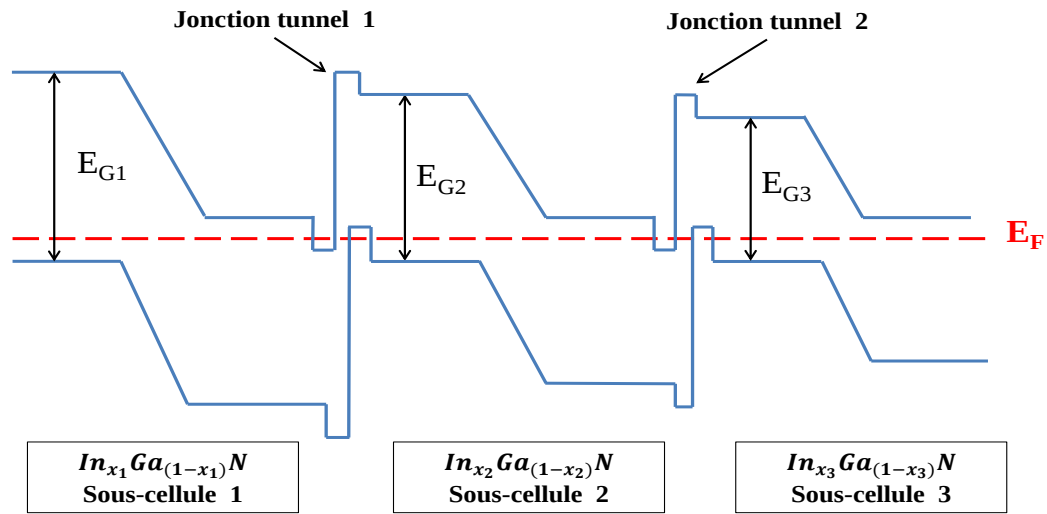


FIGURE IV.4 – Diagramme de bandes d'énergie simplifié d'une cellule solaire triple jonction. E_F est l'énergie de Fermi. Il s'agit ici d'un schéma de principe qui ne fait pas apparaître la complexité du diagramme de bandes, telle qu'il sera présenté par la suite.

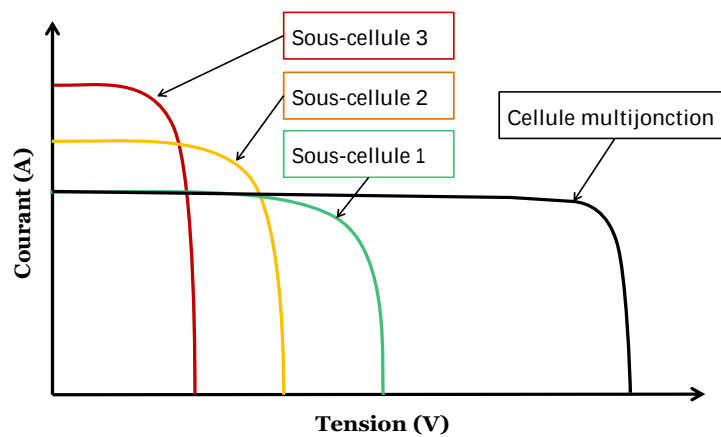


FIGURE IV.5 – Courbes courant-tension représentatives des différentes photodiodes constituant une cellule triple jonction.

E_{G1}	E_{G2}	E_{G3}	E_{G4}	E_{G5}	E_{G6}	E_{G7}	E_{G8}	$\eta(\%)$
1,34								33,68
0,94	1,60							45,71
0,94	1,37	1,90						51,58
0,71	1,11	1,49	2,00					55,31
0,70	1,01	1,33	1,67	2,14				57,61
0,69	0,96	1,20	1,47	1,79	2,24			59,41
0,69	0,93	1,14	1,37	1,60	1,90	2,33		60,78
0,51	0,75	0,98	1,18	1,40	1,63	1,92	2,35	61,42

TABLEAU IV.1 – Rendements théoriques maximaux obtenus par Bremner et al. [150] pour des cellules multijonctions comportant entre 1 et 8 sous-cellules sous éclairage AM1.5.

les satellites de communication [151]. Afin de permettre leur utilisation sur des applications terrestres, la réduction des coûts est donc nécessaire. Actuellement, la seule option technologique envisagée est l'utilisation des concentrateurs solaires. C'est un système basé sur l'utilisation de lentilles ou de miroirs paraboliques. Il est installé au-dessus des cellules et permet de concentrer le rayonnement solaire sur la cellule, réduisant ainsi les pertes de photons et la surface des cellules et donc leur coût de fabrication.

Pour les cellules solaires multijonctions à base d'InGaN, quelques études de simulation ont été réalisées. Dans le tableau IV.2, nous avons regroupé quelques résultats rapportés dans la littérature. À notre connaissance, aucune étude de simulation n'a tenu compte des jonctions tunnels reliant les différentes sous-cellules. Ces résultats sont donc obtenus en optimisant séparément les sous-cellules. Cependant, afin de connaître les performances réelles de cette technologie, il est nécessaire d'intégrer les jonctions tunnels dans l'étude. Nous allons donc voir dans la partie qui suit, l'étude d'une cellule double-jonction à base d'InGaN, incluant les jonctions tunnels dans une seule et même structure simulée et optimisée, comme un tout.

x_1	x_2	x_3	x_4	Éclairement	$\eta(\%)$	Ref.
0,48	0,73			AM1.5	35,1	[67]
0,20	1,57	0,68		AM0	38,9	[152]
0,36	0,52	0,70	0,93	AM1.5	35,59	[153]

TABLEAU IV.2 – Rendements théoriques maximaux obtenus pour des cellules multijonctions à base d'InGaN. x_1 , x_2 , x_3 et x_4 représentent respectivement les compositions d'indium des sous-cellules 1, 2, 3 et 4.

IV.2 Optimisation d'une double-jonction

Dans cette partie, nous présentons la simulation et l'optimisation d'une structure de cellule solaire double-jonction à base d'InGaN. Dans la littérature, des études sur la structure double-jonction ont déjà été réalisées [67, 154]. Cependant les jonctions tunnels reliant les différentes sous-cellules ont été ignorées dans ces études. De plus, l'optimisation paramétrique utilisée ne permet pas de déterminer le vrai rendement optimal de la cellule. Par ailleurs, les phénomènes de polarisation et la forte concentration de défauts dans InGaN n'ont pas été pris en compte. Le but ici, est donc de modéliser et optimiser une structure la plus réaliste possible et d'étudier l'influence des phénomènes de polarisation et des défauts structuraux sur les performances de la cellule.

IV.2.1 Description de la structure

La structure modélisée est représentée sur la figure IV.6. Elle est constituée de deux sous-cellules (sous-cellule 1 et sous-cellule 2) reliées par une jonction tunnel. Chaque sous-cellule est une jonction PN possédant sa propre composition d'indium. x_1 est la composition d'indium de la sous-cellule 1 et x_2 est la composition d'indium de la sous-cellule 2. x_3 représente la composition d'indium de la jonction tunnel. Les sous-cellules sont séparées du substrat par une couche tampon de GaN fortement dopée N. La cellule est sous éclairement AM1.5 et nous avons optimisé simultanément 11 paramètres de la cellule.

Les paramètres d'optimisation choisis sont ceux ayant une influence importante sur le rendement de la cellule. Nous avons donc optimisé les épaisseurs de couches des deux jonctions PN et leur dopage, la composition d'indium de chacune des jonctions et la composition d'indium de la jonction tunnel. Les épaisseurs de couches et les dopages

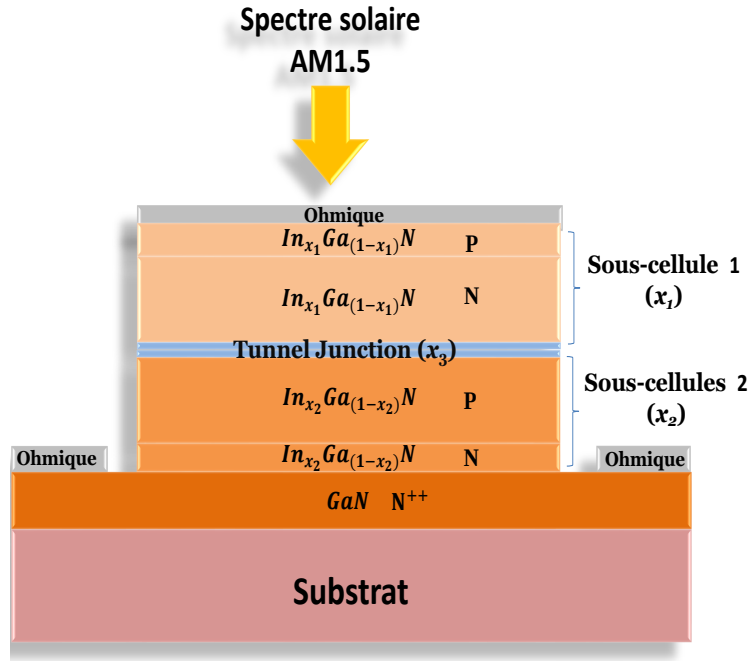


FIGURE IV.6 – Cellule solaire double-jonction à base d'InGaN. x_1 , x_2 et x_3 représentent respectivement les compositions d'indium de la sous-cellule 1, de la sous-cellule 2 et de la jonction tunnel.

de la jonction tunnel n'ont pas été inclus dans le processus d'optimisation. En effet, après plusieurs tests d'optimisation, nous avons remarqué que les couches de la jonction tunnel doivent être aussi fortement dopées et minces que la technologie le permet. Nous avons donc fixé les épaisseurs de couche de la jonction tunnel à 5nm avec des dopages de $5,0 \cdot 10^{19}\text{cm}^{-3}$. Les paramètres et les intervalles d'optimisation sont regroupés dans le tableau IV.3.

Pour modéliser l'effet tunnel dans la cellule, on peut utiliser différents modèles d'effet tunnel de type interbande permettant de calculer la densité de courant traversant la jonction tunnel. On peut citer des modèles locaux tels que celui de Kane[155, 156] ou celui de Schenk [157] qui sont fondés sur l'approximation d'un champ électrique uniforme dans la jonction. Nous avons utilisé un autre modèle avec un champ électrique non-local (champ électrique non-uniforme) étant donné que les modèles classiques locaux de Kane et Schenk ne permettant pas de modéliser correctement nos structures. Le modèle non-local, implémenté dans le simulateur Atlas, le plus réaliste dans notre cas, est très lourd en termes de temps de calcul, mais il permet de prendre en compte la variation spatiale du champ électrique dans la jonction.

Selon le point de fonctionnement de la cellule, il peut y avoir différents mécanismes

	Paramètres d'optimisation	Intervalles d'optimisation
Sous-cellule 1	$d_p(\mu m)$	$[0,01 - 0,10]$
	$d_n(\mu m)$	$[0,01 - 0,10]$
	$N_a(cm^{-3})$	$[1,0.10^{16} - 1,0.10^{19}]$
	$N_d(cm^{-3})$	$[1,0.10^{16} - 1,0.10^{19}]$
	x_1	$[0 - 1]$
Jonction tunnel	x_3	$[0 - 1]$
Sous-cellule 2	$d_p(\mu m)$	$[0,01 - 0,10]$
	$d_n(\mu m)$	$[0,01 - 0,10]$
	$N_a(cm^{-3})$	$[1,0.10^{16} - 1,0.10^{19}]$
	$N_d(cm^{-3})$	$[1,0.10^{16} - 1,0.10^{19}]$
	x_2	$[0 - 1]$

TABLEAU IV.3 – Les 11 paramètres et intervalles d'optimisation de la cellule solaire double-jonction à base d'InGaN. d_p et d_n représentent respectivement les épaisseurs de la couche P et N. N_a et N_d sont respectivement les dopages de la couche P et N. x_1 , x_2 et x_3 représentent respectivement les compositions d'indium de la sous-cellules 1, 2 et de la jonction tunnel.

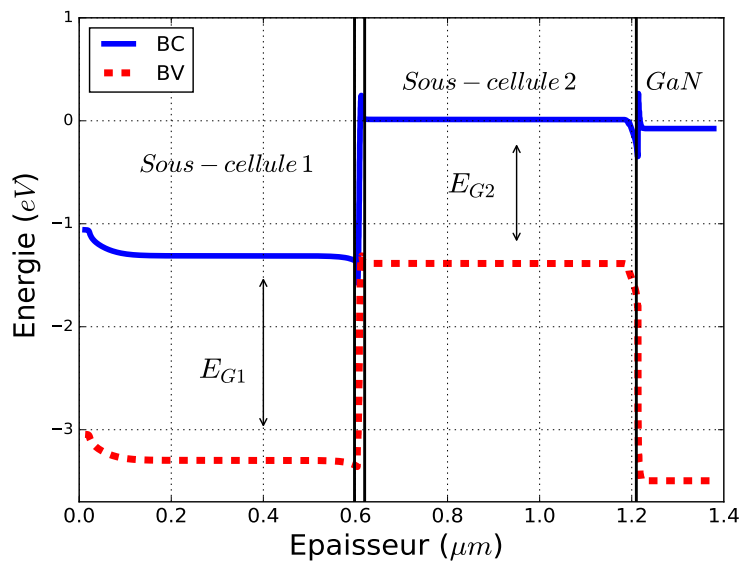


FIGURE IV.7 – Structure de bande de la cellule solaire double-jonction pour une tension proche du V_{CO} . BC représente la bande de conduction et BV, la bande de valence. E_{G1} et E_{G2} désignent respectivement, les bandes d'énergie interdite des sous-cellules 1 et 2.

d'effets tunnels. Dans le cas où la tension est proche du V_{CO} , nous avons un effet tunnel qui se produit d'une bande à l'autre (comme on le voit sur la figure IV.7) : les électrons peuvent ici passer par effet tunnel de la bande de conduction (BC) de la sous-cellule 1 vers la bande de valence (BV) de la sous-cellule 2, et vice versa pour les trous. En revanche, pour une tension proche de zéro ($V=0V$), l'effet tunnel se produit surtout dans une même bande. C'est ce que l'on appelle généralement l'« effet tunnel intrabande » (par exemple entre la BC de la sous-cellule 1 et la BC de la sous-cellule 2). Par ailleurs, du fait de la présence de niveaux d'énergie discrets dans la bande d'énergie interdite, un autre type d'effet tunnel est susceptible de se produire : c'est l'effet tunnel assisté par les défauts.

IV.2.2 Les performances de la cellule solaire

Dans ce problème d'optimisation, l'optimiseur doit trouver un ensemble de 11 paramètres optimaux et en satisfaisant autant de contraintes. Avec un si un grand nombre de paramètres, les algorithmes d'optimisation divergent souvent. De plus, la complexité de la structure à simuler entraîne des durées de calcul allongées (environ 20 mn par simulation). Cette divergence survient lorsque les paramètres initiaux de l'optimisation sont trop éloignés de leurs valeurs optimales. Concrètement, l'algorithme d'optimisation diverge lorsque les paramètres initiaux sont pris de manière aléatoire. Nous avons donc changé ce choix aléatoire des paramètres initiaux afin de pouvoir choisir ces paramètres dans des intervalles plus adéquats. Par exemple pour les compositions d'indium, nous avons choisi les paramètres initiaux de manière à ce que x_1 reste toujours inférieure à x_2 . Ceci pour permettre l'absorption des photons les plus énergétiques par la sous-cellule 1 et ceux, moins énergétiques, par la sous-cellule 2. Ensuite, plusieurs simulations avec les trois méthodes d'optimisation (L-BFGS-B, TNC, SLSQP) ont été nécessaires afin de s'assurer de la validité de la valeur du rendement optimale trouvée.

Les valeurs optimales des 11 paramètres d'optimisation sont résumées dans le tableau IV.4 et les performances de la cellule dans le tableau IV.5. Les caractéristiques courant-tension et puissance-tension obtenues avec les paramètres optimaux sont présentées sur la figure IV.8. Avec une composition d'indium de 0.40 ($E_{G1} = 1,98 \text{ eV}$), la sous-cellule 1 absorbe surtout dans le visible, tandis que la sous-cellule 2 avec une composition d'indium de 0.59 ($E_{G2} = 1,46 \text{ eV}$) absorbe dans l'infrarouge. La figure IV.9 présente la variation du taux d'absorption des photons à travers la structure, on voit que la sous-cellule 1 absorbe

Sous-cellule 1	$x_1 = 0.40$	$d_p(\mu m)$	0.01
		$d_n(\mu m)$	0.58
		$N_a(cm^{-3})$	8.04×10^{18}
		$N_d(cm^{-3})$	2.38×10^{16}
Jonction tunnel	$x_3 = 0.5$	$d_n(\mu m)$	0.005
		$d_p(\mu m)$	0.005
		$N_d(cm^{-3})$	5.00×10^{19}
		$N_a(cm^{-3})$	5.00×10^{19}
Sous-cellule 2	$x_2 = 0.59$	$d_p(\mu m)$	0.57
		$d_n(\mu m)$	0.018
		$N_a(cm^{-3})$	2.51×10^{18}
		$N_d(cm^{-3})$	1.00×10^{17}
Couche de GaN		$d_n(\mu m)$	0.16
		$N_d(cm^{-3})$	1.00×10^{19}

TABLEAU IV.4 – Ensembles des paramètres optimaux de la cellule solaire double-jonction à base d'In-GaN. d_p et d_n représentent respectivement les épaisseurs de la couche P et N. N_a et N_d sont respectivement les dopages de la couche P et N. x_1 , x_2 et x_3 représentent respectivement les compositions d'indium de la sous-cellules 1, 2 et de la jonction tunnel.

plus de photons que la sous-cellule 2. Ceci est dû au fait que l'irradiance solaire est plus intense dans le visible que dans l'infrarouge. Sur la figure IV.10, nous avons présenté la structure de bandes (bande de conduction et bande de valence) de la structure et sur la figure IV.11, nous avons présenté le potentiel électrique à travers la structure.

Performances de la cellule	$V_{CO}(V)$	$I_{CC}(mA/cm^2)$	FF(%)	$\eta(\%)$
	2,287	12,92	82,55	24,4

TABLEAU IV.5 – Performances de la cellule solaire double-jonction à base d'InGaIn. V_{CO} désigne la tension de circuit ouvert, I_{CC} le courant de court-circuit, FF le facteur de remplissage (facteur de forme) et η le rendement de la cellule solaire.

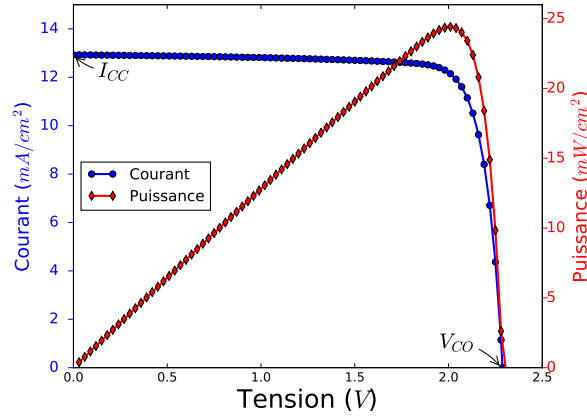


FIGURE IV.8 – Caractéristiques courant-tension et puissance-tension de la cellule solaire double-jonction obtenus avec les paramètres optimaux.

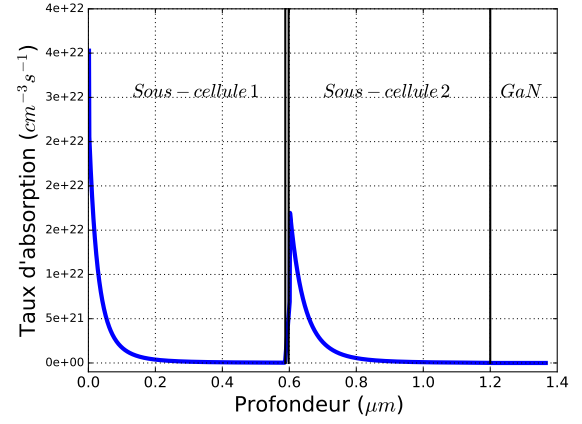


FIGURE IV.9 – Variation du taux d'absorption des photons à travers la structure.

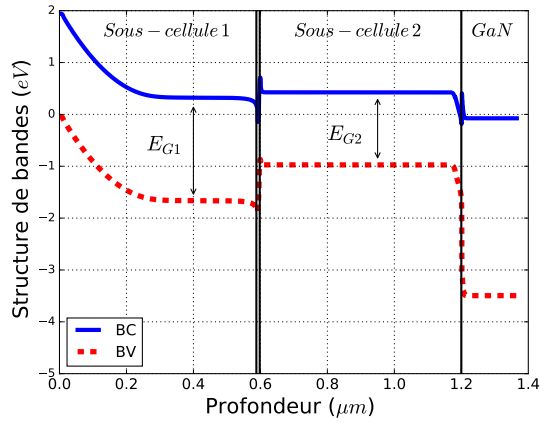


FIGURE IV.10 – Structure de bande de la cellule solaire double-jonction à l'équilibre. BC représente la bande de conduction et BV, la bande de valence. E_{G1} et E_{G2} désignent respectivement, les bandes d'énergie interdite des sous-cellules 1 et 2

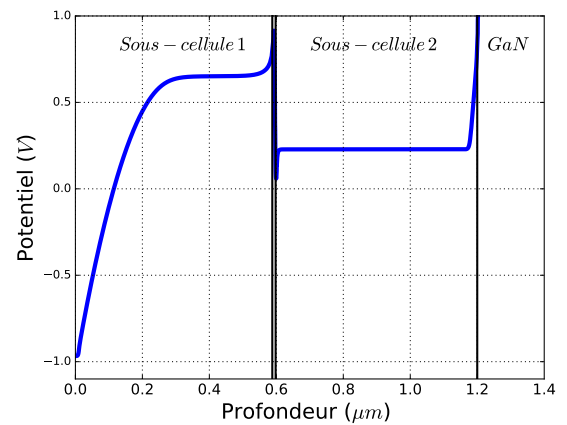


FIGURE IV.11 – Profil du potentiel électrique à travers la structure.

IV.2.3 Comparaison du résultat à la littérature

Notre étude sur la structure double-jonction à base d'InGaN a montré que le rendement optimal que l'on peut obtenir pour une telle technologie est de 24,4%. Cependant, dans la littérature, des études présentent des rendements beaucoup plus élevés. Zhang et al. ont montré que la structure double-jonction à base d'InGaN présente un rendement optimal de 35,1% [67]. Cette même étude a été également réalisée par Mesrane et al. qui ont obtenu un rendement optimal de 34,9% [154]. Ces résultats sont toutefois surestimés. En effet, dans ces études, la modélisation des phénomènes physiques est loin d'être réaliste ; par exemple, le coefficient d'absorption ou encore l'indice de réfraction du matériau sont considérés constants en fonction de la longueur d'onde et de la composition d'indium. De plus, les différents mécanismes de recombinaisons des porteurs n'ont pas été considérés. Par ailleurs, du fait de la complexité de la structure, les auteurs n'ont pas tenu compte de la jonction tunnel reliant les deux sous-cellules. Ces dernières ont été simulées séparément. Par conséquent les effets liés à la résistance série de la jonction tunnel sont ignorés.

Notre étude consiste à simuler intégralement la cellule solaire, la jonction tunnel y est donc prise en compte. En outre, notre travail est une modélisation rigoureuse de la cellule reposant sur des modèles empiriques directement déduits des données expérimentales, le tout associé à une procédure d'optimisation multivariée. Nous nous attendions donc à ce que le rendement obtenu soit, d'une part, le vrai rendement optimal de la cellule et, d'autre part, ne soit pas surestimé.

IV.3 Contraintes technologiques

Nous avons jusqu'ici, présenté les performances de la cellule solaire à double-jonction sans tenir compte de certaines contraintes technologiques actuelles, tels que la polarisation du matériau ou encore les défauts structuraux. Nous allons donc voir dans cette dernière partie leurs influences sur les performances de la cellule.

IV.3.1 Phénomènes de polarisation

Comme nous l'avons souligné dans le premier chapitre, les nitrures d'éléments III, notamment InGaN cristallisent préférentiellement dans la phase wurtzite (hexagonale)

[16]. La non centrosymétrie de la structure cristalline wurtzite et la nature fortement ionique des liaisons chimiques entraînent l'apparition d'une polarisation interne issue de la superposition des phénomènes de polarisation spontanée et piézoélectrique dans le matériau.

IV.3.1.1 Polarisation spontanée

Selon l'arrangement des atomes de gallium et d'azote lors de la croissance épitaxiale, on définit deux types de polarité : une polarité Ga, lorsque la liaison Ga-N pointe vers la surface et une polarisation N, dans le cas contraire (voir partie I.2.1.2 page 20, chapitre I). Selon l'intensité de la polarisation et le type de polarité, la polarisation spontanée va dégrader ou améliorer les performances de la cellule solaire. Dans notre cas, la polarité Ga conduit à une accumulation de charges négatives coté P et une accumulation de charges positives coté N. Pour la polarité N, c'est le contraire qui se produit. Le champ électrique associé à la polarité Ga va donc s'opposer au champ séparant les porteurs photogénérés, tandis que celui associé à la polarité N sera orienté dans le même sens que ce dernier. Par conséquent, la polarité Ga va affaiblir la séparation des porteurs de charges, alors que la polarité N va améliorer la séparation des porteurs. Cependant, nous voyons dans le tableau IV.6 que, quel que soit le type de polarité choisi, l'influence de la polarisation spontanée sur les performances de la cellule solaire double-jonction est extrêmement faible, voir négligeable.

Afin de bien mettre en évidence l'impact de la polarisation spontanée, nous avons augmenté l'intensité de la polarisation d'un facteur 2, en considérant la polarité Ga. Sur la figure IV.12, nous avons comparé les courbes courant-tension de la cellule avec et sans polarisation spontanée. Nous constatons que l'augmentation de cette polarisation entraîne une dégradation du facteur de forme de la cellule, diminuant ainsi le rendement de la cellule qui passe de 24,4 % à 19,8 %.

Par conséquent, lorsque la couche en face avant de la cellule solaire est une couche P (comme c'est le cas ici), il est préférable d'éviter une épitaxie de polarité Ga, car ce dernier va gêner la séparation des porteurs photogénérés alors qu'une épitaxie de polarité N va plutôt améliorer la séparation des porteurs.

		$V_{CO}(V)$	$I_{CC}(mA/cm^2)$	FF(%)	$\eta(\%)$
Performances de la cellule	Sans polarisation	2,287	12,92	82,55	24,4
	Polarité N	2,287	12,92	83,59	24,7
	Polarité Ga	2,287	12,92	81,06	23,9

TABLEAU IV.6 – Performances de la cellule solaire double-jonction à base d'InGaN, sans et avec la polarisation spontanée.

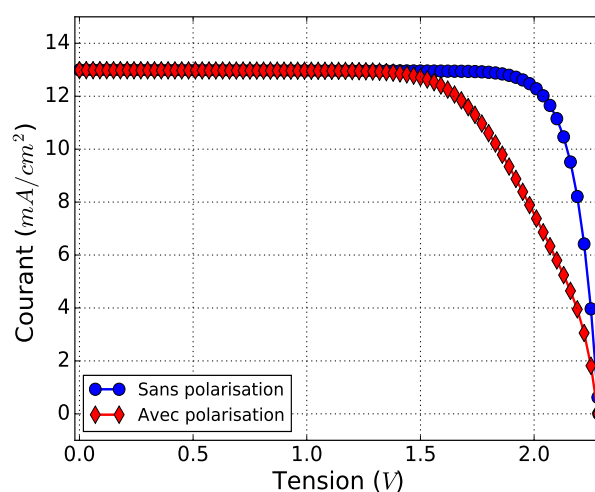


FIGURE IV.12 – Caractéristiques courant-tension obtenus avec et sans polarisation spontanée. La polarisation est amplifiée d'un facteur 2.

IV.3.1.2 Polarisation totale

Le désaccord de maille entre la couche tampon de GaN et d'InGaN entraîne un déplacement des barycentres des charges modifiant ainsi la polarisation spontanée. Ce phénomène fait apparaître une polarisation piézoélectrique (P_{pi}) qui va, soit renforcer, soit affaiblir, la polarisation spontanée (voir partie I.2.1.2 page 20, chapitre I). Si la couche InGaN subit une déformation en compression, P_{pi} est positive et si elle subit une déformation en tension, P_{pi} est négative.

Le paramètre de maille de GaN étant plus petit que celui de l'InGaN, toutes les couches hétéroépitaxiées seront soit contraintes en compression soit relaxées. Pour connaître celles qui sont contraintes et celles qui sont relaxées, nous avons tracé la variation de l'épaisseur critique¹ d'InGaN en fonction de la composition d'indium en se référant aux mesures expérimentales obtenues dans la littérature. Sachant qu'aucune mesure n'a été faite sur les épaisseurs à forte teneur en indium, nous avons ajusté les données expérimentales reportées par Parker et al. [158] et par Reed et al. [159], en utilisant le modèle de Fischer décrit dans [42], pour extrapoler les épaisseurs critiques des couches à forte teneur d'indium (voir figure IV.13). Pour l'extrapolation des données basées sur les propriétés de photoluminescence rapportées dans [158], l'épaisseur critique correspondant à une composition d'indium de $x = 0,6$ serait d'environ 30nm, alors qu'elle serait plus proche 10nm pour celles rapportées dans [159]. Par conséquent, pour nos simulations, nous avons considéré que toutes les couches ayant une épaisseur inférieure à 10nm sont contraintes et que, de ce fait, les couches ayant une épaisseur supérieure à 10nm sont relaxées. Ce processus de relaxation se produit en générant des défauts structuraux dans la couche épitaxiée, le plus souvent des dislocations, qui permettent à la couche de retrouver son paramètre de maille d'origine. Nous verrons l'impact de ces défauts sur les performances de la cellule dans la partie suivante.

En observant les épaisseurs optimales des différentes épaisseurs de la cellule, nous constatons que l'épaisseur optimale de la sous-cellule 2 dépasse largement l'épaisseur critique. Elle sera donc considérée comme étant une couche relaxée. La jonction tunnel possède, quant à elle, une épaisseur de 10 nm, elle est donc considérée comme une couche contrainte. La sous-cellule 1 possède un paramètre de maille très proche de ce-

1. C'est l'épaisseur à partir de laquelle la contrainte contenue dans la couche épitaxiée devient trop importante, entraînant la relaxation de la couche.

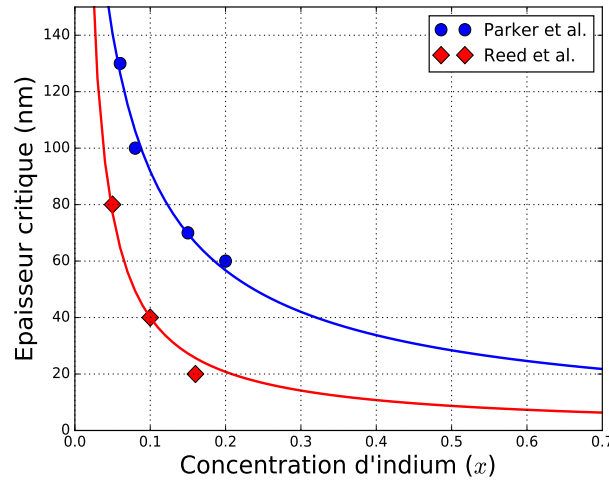


FIGURE IV.13 – Épaisseur critique de InGaN sur une couche de GaN en fonction de la composition d'indium déterminée à partir du model de Fischer [42], par extrapolation des mesures expérimentales obtenues par Parker et al. [158] et Reed et al. [159].

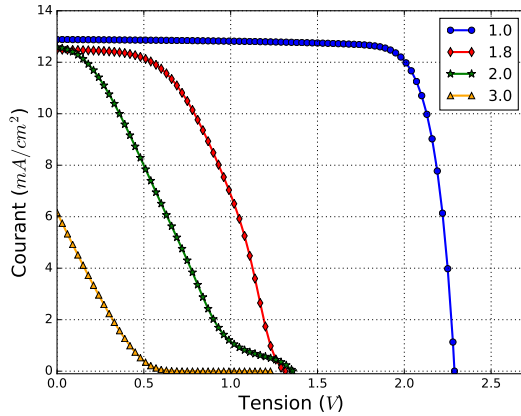
lui de la jonction tunnel. Elle sera également considérée comme une couche contrainte. Par conséquent, nous avons considéré la polarisation piézoélectrique uniquement sur la jonction tunnel et sur la sous-cellule 1.

La figure IV.14a présente les caractéristiques courant-tension $I(V)$ de la cellule correspondant à différentes quantités de charges de polarisation, dans le cas d'une polarisation Ga. Dans un premier temps, nous pouvons voir que, comme dans le cas de la polarisation spontanée, la polarisation totale de la structure n'entraîne pas une détérioration des performances de la cellule. Cependant, lorsque l'on augmente cette polarisation, nous observons une diminution importante de la tension de circuit ouvert V_{CO} puis une déformation de la courbe entraîne une forte dégradation du facteur de forme FF et une diminution du courant de court-circuit I_{CC} .

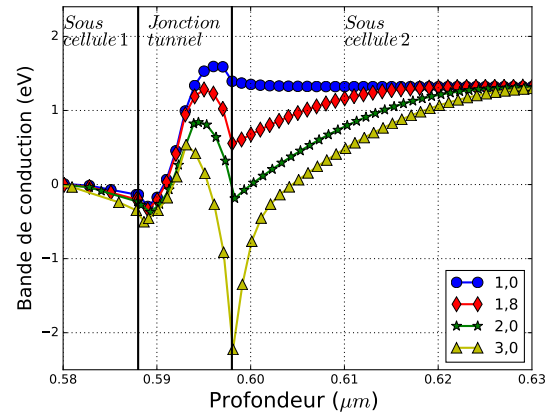
Afin d'expliquer ce comportement, nous avons présenté sur la figure IV.14b, la variation de la bande de conduction au niveau de la jonction tunnel en faisant varier la quantité de charge de polarisation. Nous pouvons observer que l'augmentation de la polarisation crée une courbure de bande à l'interface entre la jonction tunnel et la sous-cellule 2 qui augmente avec la polarisation. Ceci est dû à l'accumulation de charges de polarisation à cette interface faisant apparaître un champ électrique. Ce champ induit par la polarisation s'oppose au champ électrique initial. Il a donc tendance à abaisser le champ électrique total séparant les porteurs photogénérés dans la cellule, d'où la diminution du

V_{CO} .

En outre, la présence de ce champ induit révèle une diode polarisée en inverse, qui s'oppose à une collecte efficace des porteurs de charges. Apparaît alors un effet de seuil; lorsque le champ électrique induit par la polarisation est inférieur au champ électrique de la cellule, on observe une déformation de la caractéristique $I(V)$ qui dégrade considérablement le facteur de forme et diminue ainsi le rendement de la cellule solaire. Si le champ induit est supérieur à celui de la cellule, la déformation de la caractéristique $I(V)$ entraîne également une diminution du I_{CC} . En effet, ce champ induit va entraîner une diminution du courant dans la sous-cellule-2 et cette dernière va donc imposer son faible courant à l'ensemble de la structure.



(a) Caractéristique courant-tension pour différentes de polarisation.



(b) Variation de la bande de conduction au niveau de la jonction tunnel.

FIGURE IV.14 – Impact de la polarisation totale sur les performances de la cellule solaire. La valeur normalisée de 1,0 correspond à la valeur en C/m^2 , obtenue par la somme des valeurs expérimentales de la polarisation spontanée et piézoélectrique. Afin de mettre en évidence l'impact d'une forte polarisation, nous avons augmenté progressivement la polarisation totale de plusieurs facteurs.

Les fortes polarisations du matériau ont un effet dégradant sur les performances de la cellule double-jonction. Cependant, les valeurs de la polarisation rapportées jusqu'ici, dans la littérature n'ont pas vraiment d'influence sur les performances de la cellule double-jonction.

IV.3.2 Défauts structuraux

Les défauts structuraux se manifestent par la présence d'états dont les niveaux énergétiques associés se trouvent dans la bande d'énergie interdite. Ils ont la faculté d'émettre

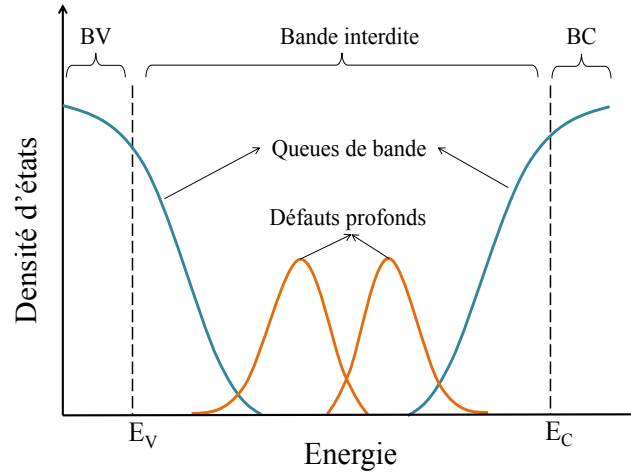


FIGURE IV.15 – Schéma illustrant des densités d'états $g(E)$ dans la bande d'énergie interdite en fonction de l'énergie, pour un semi-conducteur désordonné (Exemple : silicium amorphe hydrogéné). BC désigne la bande de conduction et BV, la bande de valence [161].

ou de capturer les porteurs libres et peuvent donc ainsi compenser des niveaux donneurs ou accepteurs et réduire la concentration et la mobilité des porteurs de charges. Ils ont donc une incidence directe sur les propriétés électriques du semi-conducteur et donc sur la cellule solaire. Nous allons voir dans cette partie, la modélisation de ces défauts structuraux et leur influence sur les performances de la cellule solaire double-jonction.

IV.3.2.1 Modélisation des défauts structuraux

Les défauts structuraux sont modélisés par une distribution gaussienne des densités d'états dans la bande interdite (défauts profonds). Les défauts profonds sont dus à la présence des défauts ponctuels (lacunes, atomes interstitiels, anti-sites, impuretés par substitution) ou des défauts étendus (dislocations) [44]. En outre, afin de tenir compte du caractère désordonné du matériau dû aux dislocations, les défauts profonds sont associées à des densités d'états de queues de bande (voir figure IV.15). Il s'agit d'une queue exponentielle qui allonge la profondeur des défauts souvent observée dans le matériau GaN [160]. La densité totale des états de défauts $g(E)$ est donc composée de quatre bandes d'énergie : deux queues de bande (donneur et accepteur) et deux bandes de défauts profonds (donneur et accepteur).

$$g(E) = g_{TD}(E) + g_{TA}(E) + g_{GD}(E) + g_{GA}(E) \quad (IV.1)$$

où E est l'énergie de l'état de défaut. $g_{TD}(E)$ et $g_{TA}(E)$ représentent respectivement

les densités d'états des queues de bande donneurs et accepteurs. $g_{GD}(E)$ et $g_{GA}(E)$ représentent les densités d'états des défauts profonds donneurs et accepteurs, respectivement. Elles sont données par les relations suivantes [162] :

$$g_{TD}(E) = N_V \exp \left[\frac{E_V - E}{W_{TD}} \right] \quad (IV.2)$$

$$g_{TA}(E) = N_C \exp \left[\frac{E - E_C}{W_{TA}} \right] \quad (IV.3)$$

$$g_{GD}(E) = N_{GD} \exp \left[- \left[\frac{E - E_{GD}}{W_{GD}} \right]^2 \right] \quad (IV.4)$$

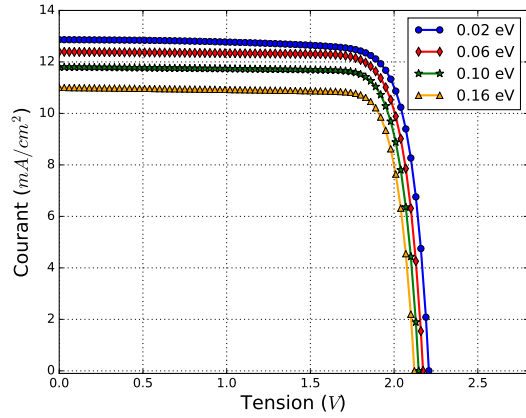
$$g_{GA}(E) = N_{GA} \exp \left[- \left[\frac{E_{GA} - E}{W_{GA}} \right]^2 \right] \quad (IV.5)$$

Pour les queues de bandes, E_C est l'énergie du bas de la bande de conduction et E_V , celle du haut de la bande valence. N_C est la densité d'états au niveau E_C et N_V , celle au niveau E_V . W_{TA} et W_{TD} représentent les largeurs caractéristiques de la queue de bande (énergie d'Urbach) au bord de la bande de conduction et de la bande valence, respectivement.

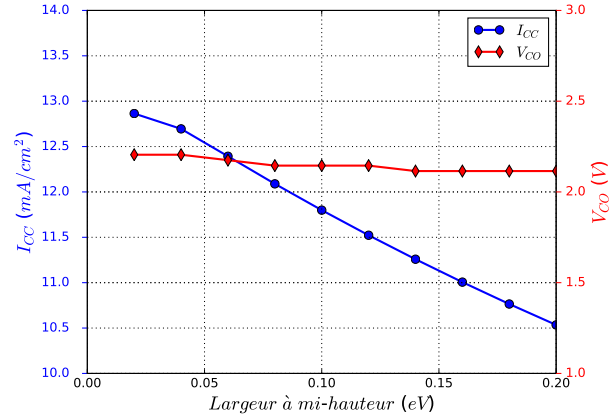
Pour les défauts profonds, N_{GD} et N_{GA} sont les densités totales d'états donneurs et accepteurs, respectivement. E_{GD} et E_{GA} sont les positions énergétiques au niveau des pics des distributions gaussiennes des défauts donneurs et accepteurs, respectivement. W_{GD} et W_{GA} sont les largeurs à mi-hauteur des distributions gaussiennes des défauts donneurs et accepteurs, respectivement.

IV.3.2.2 Influence des défauts structuraux

Nous avons étudié l'impact des défauts gaussiens (défauts profonds) sur les performances de la cellule en faisant varier dans un premier temps, la largeur à mi-hauteur (LMH) des défauts gaussiens, puis, dans un second temps, leur concentration. La figure IV.16a présente les caractéristiques courant-tension de la cellule pour différentes LMH et la figure IV.16b présente les variations du I_{CC} et du V_{CO} en fonction de la LMH. Les sections efficaces de capture des électrons et des trous sont prises égales à 10^{-14} cm^2 . L'énergie correspondant aux pics des distributions gaussiennes est fixée à 0,6eV. Les concentrations de défauts de type donneur et accepteur sont prises égales à 10^{18} cm^{-3} et 10^{17} cm^{-3} , respec-



(a) Caractéristiques courant-tension pour différentes largeurs à mi-hauteur des distributions gaussiennes des défauts profonds.



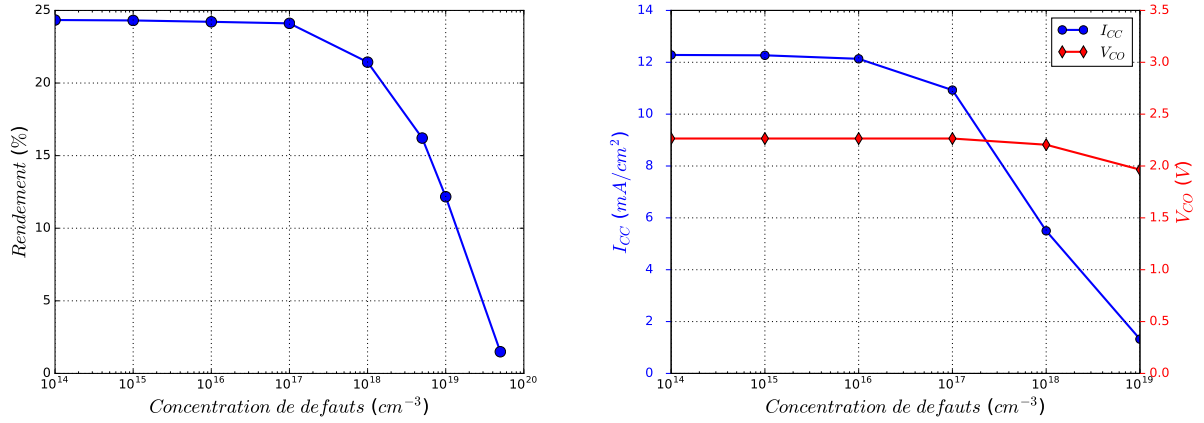
(b) Variations du I_{CC} et du V_{CO} en fonction de la largeur à mi-hauteur des distributions gaussiennes des défauts profonds.

FIGURE IV.16 – Impact de la largeur à mi-hauteur des distributions gaussiennes des défauts profonds (W_{GD} et W_{GA}) sur les performances de la cellule solaire. Les sections efficaces de capture des électrons et des trous sont prises égales à 10^{-14} cm^2 , l'énergie correspondant aux pics des distributions gaussiennes est fixée à 0,6 eV et les concentrations de défauts de type donneur et accepteur sont prises égales à 10^{18} cm^{-3} et 10^{17} cm^{-3} , respectivement.

tivement.

Nous constatons que l'augmentation de la LMH entraîne surtout une diminution du I_{CC} , et une légère diminution du V_{CO} . Les défauts gaussiens agissent comme des centres de recombinaison, l'élargissement de la LMH entraîne une augmentation des densités d'état dans la bande interdite et par conséquent, une forte probabilité de recombinaison des porteurs, d'où la diminution du I_{CC} . D'autre part, la présence de ces défauts dans la bande interdite peut entraîner des transitions bande-défaut réduisant ainsi la bande d'énergie interdite apparente du matériau d'où la diminution de V_{CO} .

Dans la figure IV.17, nous avons étudié l'impact de la concentration des défauts profonds de type donneur sur les performances de la cellule. Sur la figure IV.17a, nous avons étudié l'impact sur le rendement de la cellule et sur la figure IV.17b, nous avons représenté l'impact sur I_{CC} et V_{CO} . Nous avons étudié les défauts de type donneur, car ce sont les plus probables dans InGaN[45]. Comme nous pouvions nous y attendre, une augmentation des défauts entraîne une détérioration des performances de la cellule. Cependant, nous pouvons voir que lorsque la concentration de défauts est inférieure au dopage des couches, notamment le dopage des couche P, le rendement de la cellule reste très proche de sa valeur optimale. A l'inverse, lorsque la concentration de défauts dépasse le dopage P, les performances de la cellule chutent drastiquement comme nous le montre la figure



(a) Variation du rendement de la cellule solaire en fonction de la concentration des défauts profonds de type donneur.

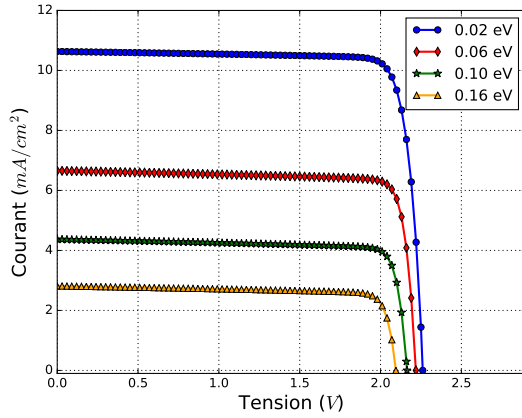
(b) Variations du I_{CC} et du V_{CO} en fonction de la concentration de défauts profonds de type donneur.

FIGURE IV.17 – Impact de la concentration des défauts profonds de type donneur sur les performances de la cellule solaire. Les sections efficaces de capture des électrons et des trous sont prises égales à 10^{-14} cm^2 , l'énergie correspondant aux pics des distributions gaussiennes est fixée à 0,6eV et une largeur à mi-hauteur LMH, de 0,05eV.

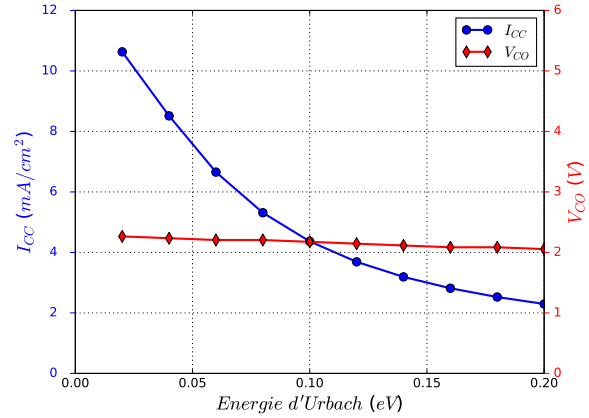
IV.17a. En effet, du fait de leur capacité à capturer les porteurs positifs, les défauts de type N vont compenser les niveaux accepteurs introduits intentionnellement, ce qui va réduire la mobilité et la concentration des porteurs de charges, réduisant ainsi le I_{CC} (figure IV.17b) et donc les performances de la cellule solaire.

Afin de voir l'impact de l'état de désordre du matériau, nous avons dans la figure IV.18, fait varier la largeur caractéristique des queues de bande (l'énergie d'Urbach) en supposant que les queues de bande conduction et de valence sont symétriques. Les concentrations de défauts de type donneur et accepteur ont été fixées respectivement à $4,6 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ et $2,3 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, correspondant à peu près à la densité d'états au niveau de la bande de valence et de conduction, respectivement. Les sections efficaces de capture des électrons et des trous sont prises égales à 10^{-14} cm^2 .

La figure IV.18a présente les caractéristiques courant-tension pour différentes énergies d'Urbach et la figure IV.18b présente les variations du I_{CC} et du V_{CO} en fonction de l'énergie d'Urbach. De la même manière que les défauts gaussiens, l'augmentation de l'énergie d'Urbach va entraîner une augmentation des états de défauts dans la bande interdite, ce qui a tendance à réduire la bande interdite et à augmenter la probabilité de recombinaison, ce qui entraîne la diminution du I_{CC} et du V_{CO} et donc des performances de la cellule.



(a) Caractéristiques courant-tension pour différentes énergies d'Urbach.



(b) Variations du I_{CC} et du V_{CO} en fonction de l'énergie d'Urbach.

FIGURE IV.18 – Impact de l'énergie d'Urbach sur les performances de la cellule solaire. Les concentrations de défauts de type donneur et accepteur ont été fixées respectivement à $4,6 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ et $2,3 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Les sections efficaces de capture des électrons et des trous sont prises égales à $1 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2$.

Celles-ci dépendent donc fortement de la qualité cristalline de InGaN. Nous avons montré que l'augmentation de la LMH entraîne une diminution des performances, toutefois, cette diminution reste faible. Par exemple, le rendement de la cellule passe de 22,90% à 19,45% lorsqu'on varie la LMH de 0,02 eV à 0,20 eV, le facteur de forme FF, reste inchangé autour de 81%. Ensuite, nous avons vu que la concentration de défauts n'a quasiment pas d'influence sur les performances de la cellule lorsque celle-ci est inférieure au dopage de type P. Enfin, nous avons vu que l'augmentation de l'énergie d'Urbach entraîne également une diminution des performances de la cellule. Cependant, on remarque que cette diminution est beaucoup plus importante que celle due à l'augmentation de la LMH. En effet, lorsqu'on varie l'énergie d'Urbach de 20 meV à 60 meV, le I_{CC} passe de 10 à 6,65 mA/cm^2 alors que la variation de la LMH de 20 meV à 160 meV ne provoque qu'une légère diminution du I_{CC} de 12,8 à 10,5 mA/cm^2 . On peut ainsi conclure qu'il est très important de maintenir la concentration de défaut inférieure au dopage de type P pour limiter l'impact de ces défauts. Le désordre quant à lui a un impact considérable sur les performances de la cellule et sera la clé du développement de cellules à multijonction.

IV.3.3 Qualité des interfaces

La qualité des interfaces est capitale pour assurer le bon fonctionnement des cellules solaires. Parmi les propriétés des interfaces, on distingue les défauts d'interface et les résistances des contacts ohmiques. Deux propriétés déterminantes pour le transport électronique dans la cellule solaire. Nous allons donc regarder leurs influences sur les performances de la cellule à double-jonction à base d'InGaN.

IV.3.3.1 Défauts d'interface InGaN/GaN

Comme dans le volume, les dislocations dues aux forts désaccords de paramètre de maille entre les couches épitaxiées engendrent au niveau des hétéro-interfaces des concentrations de défauts importantes. Plus particulièrement dans l'interface InGaN/GaN. La figure IV.19 présente la variation du rendement en fonction de la densité de défauts à l'interface InGaN/GaN. Les couches formant cette interface sont de type N. Nous avons donc regardé l'influence des défauts de types accepteurs qui sont surtout dus aux lacunes de gallium et qui sont très probables dans les conditions d'un dopage de type N [45].

Nous pouvons voir que l'augmentation des défauts dans l'interface InGaN/GaN (figure IV.19) entraîne une diminution importante du rendement de conversion de la cellule pour les densités supérieures à $5.10^{13}\text{cm}^{-2}/\text{eV}$. Ceci est dû à une diminution du V_{CO} et surtout à la dégradation du facteur de forme (FF). En effet, ces défauts à interface InGaN/GaN vont générer des fortes résistances de contact, entraînant une augmentation de la résistance série de la cellule, d'où la dégradation du FF. L'amélioration de la qualité des contacts au niveau des interfaces représente donc également un enjeu important pour la réalisation des structures multifonctions. En effet, comme la polarisation, leurs propriétés influent surtout le facteur de forme de la cellule donc directement sur le fonctionnement de la cellule.

IV.3.3.2 Influence de la résistance des contacts

La métallisation des contacts ohmiques est l'une des étapes les plus importantes de la fabrication des cellules solaires. Étant donné que les matériaux utilisés ont des résistivités spécifiques, il existe donc inévitablement des résistances de contact susceptibles de dégrader les performances de la cellule solaire. Pour la technologie III-N, notamment pour le GaN, ce sont les alliages à base de titane et d'aluminium (Ti/Al) qui sont les plus utilisés

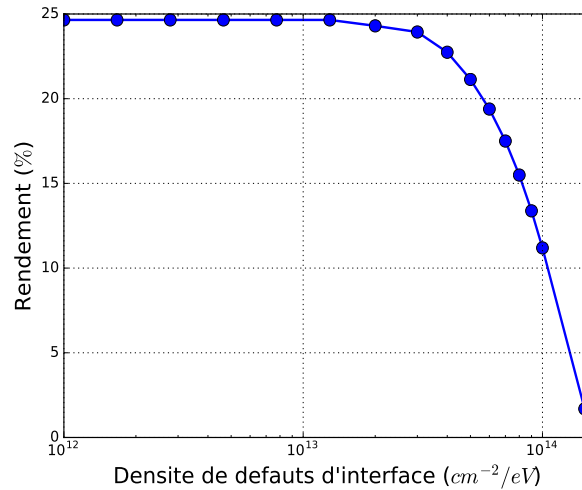


FIGURE IV.19 – Variation du rendement de la cellule double-jonction en fonction de la densité de défauts à l'interface InGaN/GaN.

pour la réalisation des contacts ohmiques. D'autres alliages sans aluminium comme les alliages Ti/Au, Pt/Au, Ni/Au, Pt/Ag ... ont été également étudiés pour améliorer la fiabilité des contacts [140, 163–165]. Ils restent cependant très difficiles à maîtriser. Sur une couche de type N, on a rapporté dans la littérature pour les contacts ohmiques sur GaN, des résistances de contact variant entre 10^{-8} à $10^{-5} \Omega \cdot \text{cm}^2$ (pour des dopages de l'ordre de 10^{18}cm^{-3}) [140, 166]. Au niveau de la couche P, c'est encore plus délicat. La réalisation de contacts ohmiques de qualité avec une faible résistance de contact reste toujours problématique. On a rapporté dans la littérature, des résistances de contact variant entre 10^{-6} à $10^{-2} \Omega \cdot \text{cm}^2$ [166–169]. Nous allons donc voir dans cette partie, l'impact de cette résistance de contact sur les performances de la cellule double-jonction. Nous avons pour cela, tenu compte des résistances spécifiques de contact (R_c) pour les contacts ohmiques et des vitesses de recombinaison à l'interface métal/semi-conducteur. Nous avons considéré des contacts avec des épaisseurs de 10 nm et avons considéré la même résistance sur les deux contacts.

La figure IV.20 présente la variation du rendement en fonction de la résistance des contacts de la cellule. La variation de R_c montre que pour une résistance inférieure à $1 \Omega \cdot \text{cm}^2$, les performances de la cellule ne sont pas impactées. En revanche, nous avons enregistré une diminution importante des performances pour les résistances supérieures à $10 \Omega \cdot \text{cm}^2$, liée principalement à un abaissement du facteur de forme (FF) de la cellule. En effet, la résistance des contacts est directement liée à la résistance série globale (R_s) de la cellule, son augmentation entraîne donc l'augmentation de la résistance série provoquant

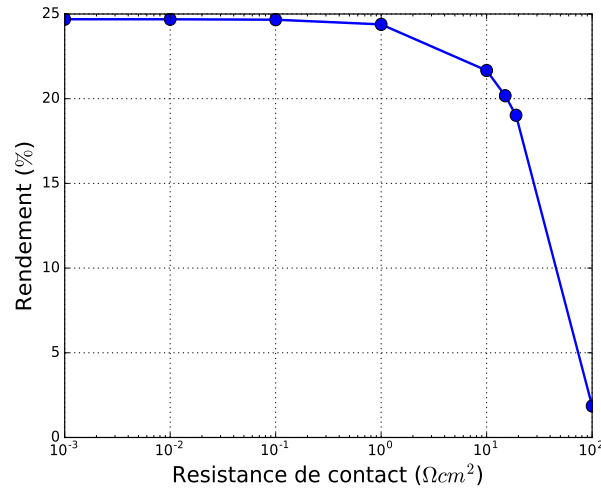


FIGURE IV.20 – Variation du rendement de la cellule double-jonction en fonction de la résistance des contacts ohmiques.

la diminution du FF donc du rendement. La valeur de $10\Omega\cdot\text{cm}^2$ correspond approximativement à la valeur de la résistance série spécifique de la cellule. C'est pourquoi toute résistance de contact inférieure à cette valeur n'aura pas beaucoup d'impact sur les performances de la cellule double-jonction. La qualité des contacts ohmiques est donc également essentielle pour garantir que les performances de la cellule restent très proches de l'optimum (c'est-à-dire 24,4%). Cependant, on montre ici que pour la structure à double-jonction, les résistances mesurées et rapportées dans la littérature ont un impact très limité sur les performances de la cellule. En outre, il existe déjà des techniques permettant de diminuer les résistances de contact, notamment une approche qui consiste à surdoper les zones proches des contacts pour faciliter le passage par effet tunnel des porteurs de charges.

Notre étude a donc démontré que le potentiel de la technologie InGaN ne peut être pleinement exploité qu'après avoir maîtrisé l'ensemble de ces contraintes. Plus particulièrement, celles liées aux défauts structuraux, généralement plus élevées dans les couches épitaxiées d'InGaN. Nous avons vu que le rendement optimal de la cellule est approximativement de 10%, pour une densité de défauts de $10^{18}\text{cm}^{-3}/\text{eV}$.

Par ailleurs, si maintenant, on tient compte à la fois de la polarisation et des défauts structuraux avec une densité de $10^{19}\text{cm}^{-3}/\text{eV}$, le rendement de la cellule double-jonction n'est que de 4,6%. Comme pour les structures à simple jonction (Schottky, MIN), lorsque l'on considère les contraintes technologiques actuelles, le rendement de la cellule chute

considérablement et devient comparable à ceux obtenus expérimentalement avec d'autres technologies à base d'InGaN [63, 68]. Nous remarquons donc ici, que, quelle que soit la technologie, le rendement des cellules solaires à base d'InGaN ne dépassera pas les 5% avec les contraintes technologiques actuelles. En effet, c'est une limite surtout due aux propriétés du matériau InGaN et non à la technologie utilisée.

Conclusion du chapitre

Ce dernier chapitre a été consacré à l'étude d'une structure de cellule solaire double-jonction à base d'InGaN. Dans un premier temps, nous avons présenté les principes physiques des dispositifs à multijonctions qui permettraient d'aller vers le haut rendement de conversion d'une cellule solaire. Par la suite, nous avons présenté les performances de la structure double-jonction optimisée en fonction de onze paramètres de la cellule. L'étude a montré qu'une telle structure peut fournir un rendement maximal d'environ 24,4%. Dans la littérature, des études présentent des rendements plus élevés. Cependant, ce sont des résultats obtenus en négligeant certains phénomènes physiques. Particulièrement, l'effet de la jonction tunnel reliant les deux sous-cellules. Enfin, dans la troisième et dernière partie, nous avons montré que plusieurs facteurs peuvent dégrader les performances de la cellule, notamment l'effet de la polarisation du matériau, les défauts structuraux et l'effet de la résistance des contacts. Nous avons vu que si l'on inclut ces contraintes, la cellule présente un rendement de 4,6% comparable à ceux obtenus expérimentalement avec d'autres technologies à base d'InGaN. Par ailleurs, contrairement aux structures à simple jonction, nous ne pouvons pas pour cette structure éviter les difficultés liées à l'élaboration de la couche P. On peut éventuellement se passer de la couche P pour la première sous-cellule. La maîtrise de tous ces facteurs est donc primordiale pour rendre cette nouvelle technologie compétitive par rapport aux autres technologies, notamment les technologies silicium et III-V.

Conclusion générale

Ce travail de thèse s'est donné pour objectif de simuler et d'optimiser des structures de cellules solaires à base d'InGaN. Nous avons utilisé une approche de simulation rigoureuse basée essentiellement sur des modèles et des paramètres empiriques, associée à une nouvelle approche d'optimisation des cellules solaires. L'une des originalités de ce travail consistait donc à utiliser des méthodes d'optimisation mathématique associées à des modèles physiques empiriques pour étudier les performances optimales de différentes structures de cellules solaires à base d'InGaN.

L'alliage InGaN est depuis plusieurs années étudié pour des dispositifs optoélectroniques, notamment photovoltaïques. Dans le premier chapitre, nous avons présenté les principales propriétés de l'alliage InGaN. Nous avons vu que le matériau InGaN possède plusieurs avantages, le plus notoire étant la large couverture spectrale de sa bande d'énergie interdite qui permet de concevoir des cellules solaires multijonctions à haut rendement en utilisant le même matériau. Cependant, nous avons également vu que ce matériau possède certains inconvénients dont les principaux sont le manque de substrat adapté, et la difficulté d'élaborer une couche de type P, constituant ainsi des verrous technologiques majeurs qu'il faut lever.

Les simulations des structures de cellules solaires ont été réalisées avec le logiciel Atlas. Dans le deuxième chapitre, nous avons présenté le modèle dérive-diffusion utilisé par Atlas ainsi que les différents modèles physiques décrivant les comportements des porteurs de charges dans le matériau. Ensuite, nous avons présenté différentes approches utilisées pour optimiser les structures de cellules solaires. Nous avons vu que l'optimisation paramétrique quasiment uniquement utilisée pour optimiser les cellules solaires ne peut garantir de trouver le rendement optimal des cellules. En effet, c'est une approche qui permet d'optimiser le rendement de la cellule en ne faisant varier qu'un seul paramètre à la fois. Les paramètres d'optimisation doivent donc évoluer de manière indé-

pendante les uns des autres, ce qui n'est pas le cas pour une cellule solaire. Nous avons alors, développé une nouvelle approche qui permet d'optimiser le rendement d'une cellule solaire en optimisant simultanément plusieurs paramètres de la cellule et ainsi tenir compte de l'interdépendance des paramètres. C'est une optimisation multivariée utilisant différentes méthodes mathématiques d'optimisation incorporées dans le langage de programmation *Python*. Compte tenu de la diversité des types de méthodes, nous avons réalisé plusieurs tests de ces méthodes sur une simple structure PN en évaluant principalement trois critères : la convergence de la méthode, le respect des intervalles d'optimisation et le temps de convergence. Au moins trois méthodes répondent à ces critères et ont été utilisées pour optimiser les différentes structures de cellules solaires étudiées dans ce travail de thèse. Ces méthodes ont été utilisées avec le simulateur Atlas grâce à un programme qui génère l'ensemble de la procédure d'optimisation et de simulation.

Afin d'éviter les contraintes technologiques liées à l'élaboration de la couche P, nous avons dans le troisième chapitre, présenté l'étude de cellules solaires sans couche P. Dans un premier temps, nous avons simulé et optimisé une structure Schottky composée d'une couche InGaN dopée N en contact avec une couche métallique de 5 nm. Cinq paramètres de la structure ont été optimisés et nous avons trouvé un rendement optimal de 18,2% obtenu avec une composition d'indium de 0,56 pour un travail de sortie de la couche métallique de 6,3eV. Une performance satisfaisante pour une structure à jonction simple. Nous avons également présenté l'étude d'une structure MIN que nous avons proposée et qui inclut une couche "intrinsèque" d'InGaN. Nous avons pour cette structure, optimisé six paramètres et la cellule présente un rendement optimal de 19,8%. Outre ses performances qui sont légèrement supérieures à celles de la structure Schottky, les paramètres optimaux de la structure MIN présentent des intervalles de tolérances plus larges que ceux de la structure Schottky. C'est ce qui donne à la structure MIN un avantage considérable pour la réalisation de la cellule solaire.

Une étude sur les structures à jonction simple (PN et PIN) a été ensuite réalisée afin de les comparer avec les structures sans couche P (Schottky, MIN). La structure PN présente un rendement optimal de 17,8% et la structure PIN présente, quant à elle, un rendement optimal de 19,0%. Des performances légèrement inférieures par rapport aux structures sans couche P. Ces dernières constituent donc de très bonnes alternatives aux structures PN et PIN conventionnelles.

Enfin, la dernière partie du troisième chapitre porte sur les contraintes actuelles de la technologie InGaN, notamment, la difficulté de réaliser de fortes incorporations d'indium dans l'alliage InGaN. Nous avons réoptimisé les structures PN et Schottky en tenant compte des limites actuelles en teneur d'indium et en épaisseur de couche. En incorporant à la simulation les contraintes technologiques actuelles et les défauts structuraux présents dans le matériau, nous avons retrouvé et, pour la première fois, un rendement optimal d'environ 3% correspondant approximativement aux résultats des études expérimentales d'autres équipes.

Le dernier chapitre de ce travail est consacré à l'étude d'une structure multijonction. Nous avons simulé et optimisé une structure double-jonction. Pour cette structure, onze paramètres ont été optimisés simultanément. La cellule présente un rendement optimal de 24,4%. Nous avons ensuite étudié les effets susceptibles de dégrader les performances de la cellule, notamment la polarisation et les défauts structuraux. Nous avons vu que les valeurs de la polarisation rapportées dans la littérature n'ont quasiment aucune influence sur les performances de la cellule. En revanche, l'augmentation de la polarisation entraîne une forte diminution des performances due à une accumulation de charges aux interfaces. Nous avons également vu en fin de chapitre, que si l'on inclut ces différentes contraintes, la cellule présente un rendement de 4,6% comparable à ceux obtenus expérimentalement avec d'autres technologies à base d'InGaN.

Ce travail nous a donc permis de mieux évaluer les performances de différentes cellules solaires à base d'InGaN, de comprendre les difficultés rencontrées actuellement pour leurs réalisations et de fournir des moyens et des outils quantitatifs sur les aspects technologiques sur lesquels l'effort doit porter. La suite logique de ce travail pourrait être axée sur les thématiques suivantes :

- **Élaboration et caractérisation des structures Schottky sur InGaN.** En effet, ce travail a montré qu'avec les contraintes technologiques actuelles, on peut atteindre un rendement de l'ordre de 3 % sur InGaN en utilisant, par exemple, du platine, ce qui serait une première mondiale. Il s'agira ensuite d'accélérer le développement de cette technologie Schottky/InGaN pour atteindre le rendement de 18 % prédit par nos études.
- **Optimisation de structures InGaN avec trois et quatre jonctions.** Il s'agira d'un travail délicat avec au moins une vingtaine de paramètres d'optimisation et plu-

sieurs jonctions tunnel. Il y a à la fois un travail de simulation, d'optimisation mathématique et modélisation physique. Cette étude peut être étendue aux structures tandem à hétérojonction telles que celles associant l'InGaN au silicium ou aux matériaux III-V.

- **Étude de structures de cellules solaires InGaN semi-polaires.** En effet, l'élaboration de structures III-N semi-polaires connaît actuellement un intérêt croissant et leur étude pourrait permettre de concevoir des cellules solaires avec un impact réduit de la polarisation. Cet impact est en effet important dans les structures III-N polaires, comme nous l'avons étudié quantitativement dans ce travail.
- **Étude des systèmes optiques de concentration du rayonnement solaire.** En effet les cellules solaires à multijonction InGaN, du fait de leur gap modulable et de leur grande résistance au rayonnement et à la température, sont destinées notamment aux systèmes à concentration. Le travail d'optimisation fait ici sur les cellules à multijonction est parfaitement adaptable pour l'optimisation de l'ensemble du système comprenant le concentrateur et les cellules solaires.

Au delà de l'optimisation de cellules et de systèmes photovoltaïques, les méthodes d'optimisation développées dans ce travail peuvent être adaptées à d'autres dispositifs de l'optoélectronique et de la microélectronique.

Bibliographie

- [1] British Petroleum. *BP statistical review of world energy*. London : British Petroleum, 2017. 1
- [2] I. S. E. Fraunhofer. Photovoltaics report. *Fraunhofer ISE, Freiburg*, 2017. 1, 12, 13, 15
- [3] Martin A. Green, Keith Emery, Yoshihiro Hishikawa, Wilhelm Warta, and Ewan D. Dunlop. Solar cell efficiency tables (version 48). *Progress in Photovoltaics : Research and Applications*, 24(7) :905–913, July 2016. 1, 2, 14, 15, 16, 17, 89, 90, 110, 111
- [4] William Shockley and Hans J. Queisser. Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells. *Journal of applied physics*, 32(3) :510–519, 1961. 1
- [5] Henry Mathieu and Hervé Fanet. *Physique des semiconducteurs et des composants électroniques*, volume 5. Dunod Paris, 2001. 6, 46, 78, 79
- [6] *Conversion photovoltaïque : du rayonnement solaire à la cellule*. Ed. Techniques Ingénieur. 6
- [7] Anne Labouret and Michel Villoz. *Energie solaire photovoltaïque - 4ème édition*. Dunod, October 2009. Google-Books-ID : PtaPEVAC9bgC. 9, 11
- [8] Anne Labouret and Michel Villoz. *Installations photovoltaïques-5e éd. : Conception et dimensionnement d'installations raccordées au réseau*. Dunod, 2012. 11
- [9] Les différents types de cellules photovoltaïques - Médiaterre. 14
- [10] Photovoltaïque.info Centre de ressources sur les panneaux solaires et la production d'électricité Les technologies de cellules solaires photovoltaïques. 15
- [11] Woon Seok Yang, Jun Hong Noh, Nam Joong Jeon, Young Chan Kim, Seungchan Ryu, Jangwon Seo, and Sang Il Seok. High performance photovoltaic perovskite

- layers fabricated through intramolecular exchange. *Science*, 348(6240) :1234–1237, 2015. 16
- [12] Le tour du monde en avion solaire. *Le Figaro*, November 2007. 18
- [13] Au Japon, le succès d’une PME lilloise dans le solaire flottant, November 2015. 18
- [14] Normandie. La première route solaire de France voit le jour, December 2016. 18
- [15] Snooz. Heli On : un chargeur solaire pour smartphone, à enrouler dans la poche, November 2015. 18
- [16] S. Pereira, M. R. Correia, E. Pereira, K. P. O’Donnell, E. Alves, A. D. Sequeira, N. Franco, I. M. Watson, and C. J. Deatcher. Strain and composition distributions in wurtzite InGaN/GaN layers extracted from x-ray reciprocal space mapping. *Applied physics letters*, 80(21) :3913–3915, 2002. 19, 123
- [17] Feng Shi. GaN Nanowires Fabricated by Magnetron Sputtering Deposition. 2011. 20
- [18] O. Ambacher, J. Smart, J. R. Shealy, N. G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, W. J. Schaff, L. F. Eastman, R. Dimitrov, L. Wittmer, and others. Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization charges in N- and Ga-face AlGaN/GaN heterostructures. *Journal of applied physics*, 85(6) :3222–3233, 1999. 20
- [19] F. Bernardini and V. Fiorentini. Nonlinear behavior of spontaneous and piezoelectric polarization in III-V nitride alloys. *physica status solidi(a)*, 190(1) :65–73, 2002. 21, 22
- [20] I. Vurgaftman and J. R. Meyer. Band parameters for nitrogen-containing semiconductors. *Journal of Applied Physics*, 94(6) :3675–3696, 2003. 21
- [21] Fabio Bernardini, Vincenzo Fiorentini, and David Vanderbilt. Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides. *Physical Review B*, 56(16) :R10024–R10027, October 1997. 21, 22
- [22] Joachim Piprek. *Semiconductor Optoelectronic Devices : Introduction to Physics and Simulation*. Academic Press, October 2013. Google-Books-ID : qqVuFz1kDp0C. 23, 46, 47, 48

- [23] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, and L. R. Ram-Mohan. Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys. *Journal of applied physics*, 89(11) :5815–5875, 2001. 23
- [24] M. Anani, H. Abid, Z. Chama, C. Mathieu, A. Sayede, and B. Khelifa. InGaN refractive index calculations. *Microelectronics Journal*, 38(2) :262–266, February 2007. 24
- [25] M. Hori, K. Kano, T. Yamaguchi, Y. Saito, T. Araki, Y. Nanishi, N. Teraguchi, and A. Suzuki. Optical Properties of InGaN with Entire Alloy Composition on InN Buffer Layer Grown by RF MBE. *physica status solidi (b)*, 234(3) :750–754, December 2002. 24, 25
- [26] Junqiao Wu. When group-III nitrides go infrared : New properties and perspectives. *Journal of Applied Physics*, 106(1) :5, 2009. 25, 32
- [27] GF Brown, JW Ager III, W Walukiewicz, and J Wu. Finite element simulations of compositionally graded InGaN solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 94(3) :478–483, 2010. 00089. 25, 26, 49, 50, 79
- [28] J. Wu and W. Walukiewicz. Band gaps of InN and group III nitride alloys. *Superlattices and Microstructures*, 34(1) :63–75, 2003. 52, 55
- [29] G. Franssen, I. Gorczyca, T. Suski, A. Kamińska, J. Pereiro, E. Munoz, E. Iliopoulos, A. Georgakilas, S. B. Che, Y. Ishitani, and others. Bowing of the band gap pressure coefficient in InGaN alloys. *Journal of Applied Physics*, 103(3) :033514, 2008. 26, 52
- [30] Nicolas Richet. *Les cellules photovoltaïques en silicium : théorie et fabrication*. EDP Sciences, April 2017. Google-Books-ID : mqOyDgAAQBAJ. 27, 28, 51, 52
- [31] Jean-Louis Coutaz. *Optoélectronique terahertz*. EDP Sciences, December 2012. Google-Books-ID : ZvAaiQOUi5gC. 27, 52
- [32] A. M. Fischer, Y. O. Wei, F. A. Ponce, M. Moseley, B. Gunning, and W. A. Doolittle. Highly luminescent, high-indium-content InGaN film with uniform composition and full misfit-strain relaxation. *Applied Physics Letters*, 103(13) :131101, 2013. 28, 82, 89, 96
- [33] Chloe A.M. Fabien, Brendan P. Gunning, W. Alan Doolittle, Alec M. Fischer, Yong O. Wei, Hongen Xie, and Fernando A. Ponce. Low-temperature growth of InGaN films

- over the entire composition range by MBE. *Journal of Crystal Growth*, 425 :115–118, September 2015. 00002. 28, 82, 96
- [34] Eric Feltin. *Hétéro-épitaxie de Nitrure de Gallium sur substrat de silicium (111) et applications*. 2003. Google-Books-ID : HN87XwAACAAJ. 28
- [35] Pavel Aseev, Paul E. D. Soto Rodriguez, Víctor J. Gómez, Naveed ul Hassan Alvi, José M. Manuel, Francisco M. Morales, Juan J. Jiménez, Rafael García, Alexander Senichev, Christoph Lienau, Enrique Calleja, and Richard Nötzel. Near-infrared emitting In-rich InGaN layers grown directly on Si : Towards the whole composition range. *Applied Physics Letters*, 106(7) :072102, February 2015. 00000. 29
- [36] Vanessa Gorge. *Caractérisations de matériaux et tests de composants des cellules solaires à base des nitrures des éléments III-V*. phdthesis, Université Paris Sud - Paris XI, May 2012. 29
- [37] Youssef El Gmili. *Étude et caractérisations par cathodoluminescence de couches minces d'InGaN pour le photovoltaïque*. Université de Lorraine, October 2013. 29
- [38] Jean-Yves Duboz. *Matériaux semi-conducteurs à grand gap III-V à base de GaN*. Ed. Techniques Ingénieur, 1999. 29
- [39] Kwiseon Kim, Walter RL Lambrecht, and Benjamin Segall. Elastic constants and related properties of tetrahedrally bonded BN, AlN, GaN, and InN. *Physical Review B*, 53(24) :16310, 1996. 29
- [40] J. W. Matthews and A. E. Blakeslee. Defects in epitaxial multilayers : I. Misfit dislocations. *Journal of Crystal Growth*, 27 :118–125, 1974. 30
- [41] R. People and J. C. Bean. Calculation of critical layer thickness versus lattice mismatch for GeSi/Si strained-layer heterostructures. *Applied Physics Letters*, 47(3) :322–324, 1985.
- [42] A. Fischer, H. Kühne, and H. Richter. New approach in equilibrium theory for strained layer relaxation. *Physical review letters*, 73(20) :2712, 1994. 125, 126
- [43] D. Holec, PMFJ Costa, M. J. Kappers, and C. J. Humphreys. Critical thickness calculations for InGaN/GaN. *Journal of Crystal Growth*, 303(1) :314–317, 2007. 30

- [44] Fong Kwong Yam, Li Li Low, Sue Ann Oh, and Zainuriah Hassan. Gallium nitride : an overview of structural defects. In *Optoelectronics-Materials and Techniques*. InTech, 2011. 30, 128
- [45] John L. Lyons and Chris G. Van de Walle. Computationally predicted energies and properties of defects in GaN. *NPJ Computational Materials*, 3 :1, 2017. 30, 31, 130, 133
- [46] A. Janotti, J. L. Lyons, and C. G. Van de Walle. Hybrid functional calculations of native point defects in InN. *physica status solidi (a)*, 209(1) :65–70, January 2012. 30, 32
- [47] Zhao Feng-Qi, Shi Jun-Jie, and Yang Mao. First-Principles Study on Native Defect Complexes in InN. *Communications in Theoretical Physics*, 53(1) :145, 2010. 30
- [48] S. K. Mathis, A. E. Romanov, L. F. Chen, G. E. Beltz, W. Pompe, and J. S. Speck. Modeling of threading dislocation reduction in growing GaN layers. *Journal of Crystal Growth*, 231(3) :371–390, 2001. 31
- [49] P. Visconti, K. Jones, Michael Reshchikov, R. Cingolani, Hadis Morkoç, and R. Molnar. Dislocation density in GaN determined by photoelectrochemical and hot-wet etching. *Applied Physics Letters*, January 2000. 31
- [50] Petr G. Eliseev, Piotr Perlin, Jinhyun Lee, and Marek Osiński. “Blue” temperature-induced shift and band-tail emission in InGa_N-based light sources. *Applied physics letters*, 71(5) :569–571, 1997. 31
- [51] B. N. Pantha, H. Wang, N. Khan, J. Y. Lin, and H. X. Jiang. Origin of background electron concentration in In_xGa_{1-x}N alloys. *Physical Review B*, 84(7) :075327, 2011. 32, 90
- [52] Mark A. Hoffbauer, Todd L. Williamson, Joshua J. Williams, Julia L. Fordham, Kin M. Yu, Wlodek Walukiewicz, and Lothar A. Reichertz. In-rich InGa_N thin films : Progress on growth, compositional uniformity, and doping for device applications. *Journal of Vacuum Science & Technology B, Nanotechnology and Microelectronics : Materials, Processing, Measurement, and Phenomena*, 31(3) :03C114, 2013. 32, 90

-
- [53] A. Yıldız, Öztürk M. Kemal, M. Bosi, S. Özçelik, and M. Kasap. Structural, electrical and optical characterization of InGaN layers grown by MOVPE. *Chinese Physics B*, 18(9) :4007, 2009. 32
 - [54] P. Perlin. Towards the Identification of the Dominant Donor in GaN, 1995. 32
 - [55] C. Stampfl, C. G. Van de Walle, D. Vogel, P. Krüger, and J. Pollmann. Native defects and impurities in InN : First-principles studies using the local-density approximation and self-interaction and relaxation-corrected pseudopotentials. *Physical Review B*, 61(12) :R7846, 2000. 32
 - [56] S. Hautakangas, J. Oila, M. Alatalo, K. Saarinen, L. Liskay, D. Seghier, and H. P. Gislason. Vacancy defects as compensating centers in Mg-doped GaN. *Physical review letters*, 90(13) :137402, 2003. 33
 - [57] Agnès Philippe. *Caractérisation électrique et optique du nitrure de gallium hexagonal et cubique en vue de l'obtention d'émetteurs bleus*. PhD thesis, 1999. 33
 - [58] Omkar Jani, Ian Ferguson, Christiana Honsberg, and Sarah Kurtz. Design and characterization of GaN/InGaN solar cells. *Applied Physics Letters*, 91(13) :132117, 2007. 33, 39
 - [59] Carl J. Neufeld, Nikholas G. Toledo, Samantha C. Cruz, Michael Iza, Steven P. DenBaars, and Umesh K. Mishra. High quantum efficiency InGaN/GaN solar cells with 2.95 eV band gap. *Applied Physics Letters*, 93(14) :143502, 2008. 34, 39
 - [60] H. Çakmak, Engin Arslan, M. Rudziński, P. Demirel, H. E. Unalan, W. Strupiński, R. Turan, M. Öztürk, and E. Özbay. Indium rich InGaN solar cells grown by MOCVD. *Journal of Materials Science : Materials in Electronics*, 25(8) :3652–3658, 2014. 34, 35, 39
 - [61] Asghar Asgari and Kh Khalili. Temperature dependence of InGaN/GaN multiple quantum well based high efficiency solar cell. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 95(11) :3124–3129, 2011. 34, 35, 39
 - [62] Z. W. Zheng, M. H. Lai, L. Y. Ying, and B. P. Zhang. High-efficiency vertical-type InGaN/GaN multiple quantum well solar cells using aluminum reflectors. In *2016 IEEE 16th International Conference on Nanotechnology (IEEE-NANO)*, pages 91–93, August 2016. 35, 39

- [63] Shiming Liu, Quan Wang, Hongling Xiao, Kun Wang, Cuimei Wang, Xiaoliang Wang, Weikun Ge, and Zhanguo Wang. Optimization of growth and fabrication techniques to enhance the InGa_N/Ga_N multiple quantum well solar cells performance. *Superlattices and Microstructures*, 109 :194–200, 2017. 35, 36, 39, 136
- [64] S. W. Zeng, B. P. Zhang, J. W. Sun, J. F. Cai, C. Chen, and J. Z. Yu. Substantial photo-response of InGa_N p–i–n homojunction solar cells. *Semiconductor Science and Technology*, 24(5) :055009, 2009. 36, 39
- [65] Md Rafiqul Islam, Md Rejvi Kaysir, Md Jahirul Islam, A. Hashimoto, and A. Yamamoto. MOVPE Growth of InGa_N and Fabrication of Homo-junction Solar Cells. *Journal of Materials Science & Technology*, 29(2) :128–136, 2013. 36, 39
- [66] Chloe A. M. Fabien and W. Alan Doolittle. Guidelines and limitations for the design of high-efficiency InGa_N single-junction solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 130 :354–363, November 2014. 37, 39, 56, 79
- [67] Xiaobin Zhang, Xiaoliang Wang, Hongling Xiao, Cuibai Yang, Junxue Ran, Cuimei Wang, Qifeng Hou, Jinmin Li, and Zhanguo Wang. Theoretical design and performance of InGa_N two-junction solar cells. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 41(24) :245104, 2008. 37, 38, 39, 116, 122
- [68] Young. High-performance broadband optical coatings on InGa_N/Ga_N solar cells for multijunction device integration. *Applied Physics Letters*, 104(16) :163902, April 2014. 38, 39, 136
- [69] Hsu. Modeling of InGa_N/Si tandem solar cells. *Journal of Applied Physics*, 104(2) :024507, July 2008. 38, 39
- [70] Xue Jun-Jun, Chen Dun-Jun, Liu Bin, Xie Zi-Li, Jiang Ruo-Lian, Zhang Rong, and Zheng You-Dou. Au/Pt/InGa_N/Ga_N Heterostructure Schottky Prototype Solar Cell. *Chinese Physics Letters*, 26(9) :098102, 2009. 39
- [71] R. Dahal, J. Li, K. Aryal, J. Y. Lin, and H. X. Jiang. InGa_N/Ga_N multiple quantum well concentrator solar cells. *Applied Physics Letters*, 97(7) :073115, 2010. 39, 104
- [72] Elison Matioli, Carl Neufeld, Michael Iza, Samantha C. Cruz, Ali A. Al-Heji, Xu Chen, Robert M. Farrell, Stacia Keller, Steven DenBaars, Umesh Mishra, and others. High

- internal and external quantum efficiency InGaN/GaN solar cells. *Applied Physics Letters*, 98(2) :021102, 2011. 39
- [73] Chih-Ciao Yang, C. H. Jang, Jinn-Kong Sheu, Ming-Lun Lee, Shang-Ju Tu, Feng-Wen Huang, Yu-Hsiang Yeh, and Wei-Chih Lai. Characteristics of InGaN-based concentrator solar cells operating under 150x solar concentration. *Optics express*, 19(104) :A695–A700, 2011. 39
- [74] X.-M. Cai, S.-W. Zeng, and B.-P. Zhang. Favourable photovoltaic effects in InGaN pin homojunction solar cell. *Electronics letters*, 45(24) :1266–1267, 2009. 39
- [75] Jenny Nelson. *The physics of solar cells*. World Scientific Publishing Co Inc, 2003. 44, 45
- [76] G. J. M. Hagelaar and L. C. Pitchford. Solving the Boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for fluid models. *Plasma Sources Science and Technology*, 14(4) :722, 2005.
- [77] Stephen Fonash. *Solar cell device physics*. Elsevier, 2012. 44
- [78] W. B. Joyce and R. W. Dixon. Analytic approximations for the Fermi energy of an ideal Fermi gas. *Applied Physics Letters*, 31(5) :354–356, 1977. 45
- [79] W. Dutton and Zhiping Yu. *SEDAN III, A Generalized Electronic Material Device Analysis Program (July 1985) Integrated Circuits Laboratory*. Stanford University. 45
- [80] John Hammersley. *Monte carlo methods*. Springer Science & Business Media, 2013. 46
- [81] Siegfried Selberherr. *Analysis and simulation of semiconductor devices*. Springer Science & Business Media, 2012. 46
- [82] Jiann S. Yuan and Juin Jei Liou. *Semiconductor device physics and simulation*. Springer Science & Business Media, 2013. 46, 47, 48
- [83] Francis Lévy. *Physique et technologie des semiconducteurs*. PPUR presses polytechniques, 1995. Google-Books-ID : ha3IfdCu2s4C. 46, 110
- [84] Mijoe Joseph. *Fundamentals of Semiconductor Physics*. Anchor Academic Publishing (aap_verlag), May 2015. Google-Books-ID : aUg8CQAAQBAJ. 47

- [85] D. M. Caughey and R. E. Thomas. Carrier mobilities in silicon empirically related to doping and field. *Proceedings of the IEEE*, 55(12) :2192–2193, 1967. 49
- [86] Muhammad Nawaz and Ashfaq Ahmad. A TCAD-based modeling of GaN/InGaN/Si solar cells. *Semiconductor Science and Technology*, 27(3) :035019, 2012. 49, 51
- [87] Shulong Wang, Hongxia Liu, Xin Song, Yulong Guo, and Zhaonian Yang. An analytical model of anisotropic low field electron mobility in wurtzite indium nitride. *Applied Physics A*, 114(4) :1113–1117, March 2014. 49
- [88] Sadao Adachi. Refractive indices of III–V compounds : Key properties of InGaAsP relevant to device design. *Journal of Applied Physics*, 53(8) :5863–5869, 1982. 50
- [89] O. Brandt, H.-J. Wünsche, H. Yang, R. Klann, J. R. Müllhäuser, and K. H. Ploog. Recombination dynamics in GaN. *Journal of crystal growth*, 189 :790–793, 1998. 51
- [90] M. Razeghi and Mohamed Henini. *Optoelectronic Devices : III-nitrides*. Gulf Professional Publishing, 2004. Google-Books-ID : WnVljK6G7h4C. 51, 52
- [91] *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices*. 51
- [92] J. Dziewior and W. Schmid. Auger coefficients for highly doped and highly excited silicon. *Applied Physics Letters*, 31(5) :346–348, 1977. 52
- [93] B. Zhou, K. S. A. Butcher, X. Li, and T. L. Tansley. Abstracts of topical workshop on III-V Nitrides. *TWN, Nagoya, Japan*, 7, 1995. 53
- [94] J. F. Muth, J. H. Lee, I. K. Shmagin, R. M. Kolbas, H. C. Casey Jr, B. P. Keller, U. K. Mishra, and S. P. DenBaars. Absorption coefficient, energy gap, exciton binding energy, and recombination lifetime of GaN obtained from transmission measurements. *Applied Physics Letters*, 71(18) :2572–2574, 1997.
- [95] K. Kumakura, T. Makimoto, N. Kobayashi, T. Hashizume, T. Fukui, and H. Hasegawa. Minority carrier diffusion length in GaN : Dislocation density and doping concentration dependence. *Applied Physics Letters*, 86(5) :052105, 2005. 53, 92
- [96] GREGORY F. Brown, J. W. Ager, W. Walukiewicz, and J. Wu. Numerical simulations of novel InGaN solar cells. In *Photovoltaic Specialists Conference (PVSC), 2009 34th IEEE*, pages 001958–001962. IEEE, 2009. 52

-
- [97] J. Wu, W. Walukiewicz, K_M Yu, J. W. Ager III, E. E. Haller, Hai Lu, and William J. Schaff. Small band gap bowing in InGaN alloys. *Applied Physics Letters*, 80(25) :4741–4743, 2002. 54
 - [98] E. Sakalauskas, Ö Tuna, A. Kraus, H. Bremers, U. Rossow, C. Giesen, M. Heuken, A. Hangleiter, G. Gobsch, and R. Goldhahn. Dielectric function and bowing parameters of InGaN alloys. *physica status solidi (b)*, 249(3) :485–488, 2012. 54
 - [99] Gaëlle Orsal, Youssef El Gmili, Nicolas Fressengeas, Jérémy Streque, Ryad Djerboub, Tarik Moudakir, S. Sundaram, Abdallah Ougazzaden, and Jean-Paul Salvestrini. Bandgap energy bowing parameter of strained and relaxed InGaN layers. *Optical Materials Express*, 4(5) :1030–1041, 2014. 54
 - [100] Matthieu Moret, Bernard Gil, Sandra Ruffenach, Olivier Briot, Ch Giesen, Michael Heuken, Simon Rushworth, T. Leese, and Marco Succi. Optical, structural investigations and band-gap bowing parameter of GaInN alloys. *Journal of Crystal Growth*, 311(10) :2795–2797, 2009. 54
 - [101] V. Yu Davydov, A. A. Klochikhin, V. V. Emtsev, S. V. Ivanov, V. V. Vekshin, F. Bechstedt, J. Furthmüller, H. Harima, A. V. Mudryi, A. Hashimoto, and others. Band Gap of InN and In-Rich $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alloys ($0.36 < x < 1$). *physica status solidi (b)*, 230(2), 2002. 55
 - [102] Maziar Farahmand, Carlo Garetto, Enrico Bellotti, Kevin F. Brennan, Michele Goano, Enrico Ghillino, Giovanni Ghione, John D. Albrecht, and P. Paul Ruden. Monte Carlo simulation of electron transport in the III-nitride wurtzite phase materials system : binaries and ternaries. *IEEE Transactions on electron devices*, 48(3) :535–542, 2001. 55
 - [103] Xiaobin Zhang, Xiaoliang Wang, Hongling Xiao, Cuibai Yang, Junxue Ran, Cuimei Wang, Qifeng Hou, and Jinmin Li. Simulation of $\text{In}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}$ single-junction solar cell. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 40(23) :7335, 2007. 56, 95
 - [104] Yves Cherruault. *Optimisation : méthodes locales et globales*. Presses Universitaires de France-PUF, 1999. 58, 59
 - [105] Jean-Christophe Culioli. *Introduction à l'optimisation*. Ellipses, 2012. 59, 60

- [106] `scipy.optimize.minimize` — SciPy v0.19.0 Reference Guide. 59, 62, 63
- [107] Elijah Polak and Gerard Ribiere. Note sur la convergence de méthodes de directions conjuguées. *Revue française d'informatique et de recherche opérationnelle, série rouge*, 3(1) :35–43, 1969. 59
- [108] Reeves Fletcher and Colin M. Reeves. Function minimization by conjugate gradients. *The computer journal*, 7(2) :149–154, 1964. 59
- [109] Michel Bierlaire. *Introduction à l'optimisation différentiable*. PPUR presses polytechniques, 2006. 59, 60, 61, 62
- [110] Roberto Battiti and Francesco Masulli. BFGS optimization for faster and automated supervised learning. In *International neural network conference*, pages 757–760. Springer, 1990. 60
- [111] Zhi Wang, I. M. Navon, X. Zou, and F. X. Le Dimet. A truncated Newton optimization algorithm in meteorology applications with analytic Hessian/vector products. *Computational Optimization and Applications*, 4(3) :241–262, 1995. 60
- [112] J. A. Nelder and R. Mead. A Simplex Method for Function Minimization. *The Computer Journal*, 7(4) :308–313, January 1965. 61
- [113] Marcel CAUDE and Alain JARDY. Chromatographie en phase, liquide : Théorie et méthodes de séparation. *Techniques de l'ingénieur. Analyse et caractérisation*, 2(P1455) :p1455–1, 1994. 61
- [114] M. J. D. Powell. An efficient method for finding the minimum of a function of several variables without calculating derivatives. *The Computer Journal*, 7(2) :155–162, January 1964. 61
- [115] Jianke Yang. Newton-conjugate-gradient methods for solitary wave computations. *Journal of Computational Physics*, 228(18) :7007–7024, 2009. 61
- [116] Ciyu Zhu, Richard H. Byrd, Peihuang Lu, and Jorge Nocedal. Algorithm 778 : L-BFGS-B : Fortran subroutines for large-scale bound-constrained optimization. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, 23(4) :550–560, 1997. 62

-
- [117] Michael JD Powell. A direct search optimization method that models the objective and constraint functions by linear interpolation. In *Advances in optimization and numerical analysis*, pages 51–67. Springer, 1994. 62
- [118] Stephen G. Nash. Newton-type minimization via the Lanczos method. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 21(4) :770–788, 1984. 63
- [119] Dieter Kraft. A software package for sequential quadratic programming. *Forschungsbericht- Deutsche Forschungs- und Versuchsanstalt für Luft- und Raumfahrt*, 1988. 63
- [120] Int SILVACO. ATLAS User’s Manual. 5, 2016. 69
- [121] SciPy — SciPy v0.19.0 Reference Guide. 72
- [122] L. L. Wu, D. G. Zhao, D. S. Jiang, P. Chen, L. C. Le, L. Li, Z. S. Liu, S. M. Zhang, J. J. Zhu, H. Wang, and others. Effects of thin heavily Mg-doped GaN capping layer on ohmic contact formation of p-type GaN. *Semiconductor Science and Technology*, 28(10) :105020, 2013. 78
- [123] Wayne K. Morrow, Changmin Lee, Steven P. DenBaars, Fan Ren, and Stephen J. Pearton. Role of graphene interlayers in mitigating degradation of Ni/Au ohmic contact morphology on p-type GaN. *Vacuum*, 128 :34–38, 2016. 78
- [124] Olivier Bonnaud. Physique des Solides, des Semiconducteurs et Dispositifs. *Université de Rennes*, 1, 2003. 78
- [125] Wei Zheng, Yun Wu, Hidehiko Shiraiwa, Mark T. Ramsbey, and Tazrien Kamal. *Memory device having high work function gate and method of erasing same*. Google Patents, June 2005. 79
- [126] Sheng S. Li. *Semiconductor physical electronics*. Springer Science & Business Media, 2012. 79
- [127] M. Salmeron, S. Ferrer, M. Jazzar, and G. A. Somorjai. Photoelectron spectroscopy study of the electronic structure of Au and Ag overlayers on Pt (100), Pt (111), and Pt (997) surfaces. *Physical Review B*, 28(12) :6758, 1983. 81
- [128] G. N. Derry and Zhang Ji-Zhong. Work function of Pt (111). *Physical Review B*, 39(3) :1940, 1989.

- [129] Divya Haridas, Arijit Chowdhuri, K. Sreenivas, and Vinay Gupta. Effect of thickness of platinum catalyst clusters on response of SnO₂ thin film sensor for LPG. *Sensors and Actuators B : Chemical*, 153(1) :89–95, 2011. 81
- [130] Florian Gossenberger, Tanglaw Roman, Katrin Forster-Tonigold, and Axel Groß. Change of the work function of platinum electrodes induced by halide adsorption. *Beilstein Journal of Nanotechnology*, 5(1) :152–161, February 2014. 81
- [131] Xuesong Li, Weiwei Cai, Jinho An, Seyoung Kim, Junghyo Nah, Dongxing Yang, Richard Piner, Aruna Velamakanni, Inhwa Jung, Emanuel Tutuc, et al. Large-area synthesis of high-quality and uniform graphene films on copper foils. *science*, 324(5932) :1312–1314, 2009. 81
- [132] Young-Jun Yu, Yue Zhao, Sunmin Ryu, Louis E Brus, Kwang S Kim, and Philip Kim. Tuning the graphene work function by electric field effect. *Nano letters*, 9(10) :3430–3434, 2009. 81
- [133] Ja-Soon Jang, Donghwan Kim, and Tae-Yeon Seong. Schottky barrier characteristics of Pt contacts to n-type InGaN. *Journal of applied physics*, 99(7) :073704, 2006. 88
- [134] S. X. Li, K. M. Yu, J. Wu, R. E. Jones, W. Walukiewicz, J. W. Ager III, W. Shan, E. E. Haller, Hai Lu, and William J. Schaff. Fermi-level stabilization energy in group III nitrides. *Physical Review B*, 71(16) :161201, 2005. 88
- [135] M. Mamor. Interface gap states and Schottky barrier inhomogeneity at metal/n-type GaN Schottky contacts. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 21(33) :335802, 2009. 88
- [136] Yong Wei. *Structural Properties of III-Nitride Semiconductors*. Arizona State University, 2014. 89
- [137] Sidi Ould Saad Hamady, Abdoulwahab Adaine, and Nicolas Fressengeas. Numerical simulation of InGaN Schottky solar cell. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 41 :219–225, 2016. 89
- [138] Eric Feltin, Stéphane Dalmaso, Philippe de Mierry, Bernard Beaumont, Hacène Lahrèche, Agnès Bouillé, Helge Haas, Mathieu Leroux, and Pierre Gibart. Green InGaN light-emitting diodes grown on silicon (111) by metalorganic vapor phase epitaxy. *Japanese Journal of Applied Physics*, 40(7B) :L738, 2001. 90

-
- [139] Andres Cuevas, Mark J. Kerr, Christian Samundsett, Francesca Ferrazza, and Gianluca Coletti. Millisecond minority carrier lifetimes in n-type multicrystalline silicon. *Applied Physics Letters*, 81(26) :4952–4954, 2002. 92
 - [140] Zhifang Fan, S. Noor Mohammad, Wook Kim, Özgür Aktas, Andrei E. Botchkarev, and Hadis Morkoç. Very low resistance multilayer Ohmic contact to n-GaN. *Applied Physics Letters*, 68(12) :1672–1674, 1996. 95, 99, 134
 - [141] Ashraful Ghani Bhuiyan, Kenichi Sugita, Akihiro Hashimoto, and Akio Yamamoto. InGaN solar cells : present state of the art and important challenges. *IEEE Journal of photovoltaics*, 2(3) :276–293, 2012. 95
 - [142] C. C. Yang, Jinn-Kong Sheu, Xin-Wei Liang, Min-Shun Huang, M. L. Lee, K. H. Chang, S. J. Tu, Feng-Wen Huang, and W. C. Lai. Enhancement of the conversion efficiency of GaN-based photovoltaic devices with AlGaN/InGaN absorption layers. *Applied Physics Letters*, 97(2) :021113, 2010. 96
 - [143] Chloe AM Fabien, Brendan P. Gunning, Joseph J. Merola, Evan A. Clinton, and W. Alan Doolittle. Large-area III-nitride double-heterojunction solar cells with record-high in-content InGaN absorbing layers. In *Photovoltaic Specialist Conference (PVSC), 2015 IEEE 42nd*, pages 1–3. IEEE, 2015. 100
 - [144] T. Mehrtens, M. Schowalter, D. Tytko, P. Choi, D. Raabe, L. Hoffmann, H. Jönen, U. Rossow, A. Hangleiter, and A. Rosenauer. Measurement of the indium concentration in high indium content InGaN layers by scanning transmission electron microscopy and atom probe tomography. *Applied Physics Letters*, 102(13) :132112, 2013. 104
 - [145] Leonid Chernyak, Andrei Osinsky, Vladimir Fuflyigin, and E. F. Schubert. Electron beam-induced increase of electron diffusion length in p-type GaN and AlGaN/GaN superlattices. *Applied Physics Letters*, 77(6) :875–877, 2000. 106
 - [146] Augustin Joseph McEvoy, Luis Castaner, and Tom Markvart. *Solar cells : materials, manufacture and operation*. Academic Press, 2012. 111
 - [147] N. Grandjean and J. Massies. Les nitrures d’éléments III : des semiconducteurs III-V singuliers? *Images de la physique-CNRS*, pages 28–35, 2001. 111

- [148] Hector Cotal, Chris Fetzer, Joseph Boisvert, Geoffrey Kinsey, Richard King, Peter Herbert, Hojun Yoon, and Nasser Karam. III–V multijunction solar cells for concentrating photovoltaics. *Energy & Environmental Science*, 2(2) :174–192, 2009. 112
- [149] Gérard Sarlos, Pierre-André Haldi, and Pierre Verstraete. *Systèmes énergétiques : Offre et demande d'énergie : méthodes d'analyse*, volume 21. PPUR presses polytechniques, 2003. 113
- [150] S. P. Bremner, M. Y. Levy, and C. Bo Honsberg. Analysis of tandem solar cell efficiencies under AM1.5g spectrum using a rapid flux calculation method. *Progress in photovoltaics : Research and Applications*, 16(3) :225–233, 2008. 113, 115
- [151] D. J. Friedman. Progress and challenges for next-generation high-efficiency multijunction solar cells. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 14(6) :131–138, 2010. 115
- [152] Baldomero Garcia. *Indium gallium nitride multijunction solar cell simulation using silvaco atlas*. PhD thesis, Monterey California. Naval Postgraduate School, 2007. 116
- [153] Jih-Yuan Chang, Shih-Hsun Yen, Yi-An Chang, Bo-Ting Liou, and Yen-Kuang Kuo. Numerical investigation of high-efficiency InGaN-based multijunction solar cell. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 60(12) :4140–4145, 2013. 116
- [154] A. Mesrane, A. Mahrane, F. Rahmoune, and A. Oulebsir. Theoretical Study and Simulations of an InGaN Dual-Junction Solar Cell. *Journal of Electronic Materials*, pages 1–8, December 2016. 116, 122
- [155] E. O. Kane. Zener tunneling in semiconductors. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 12(2) :181–188, January 1960. 117
- [156] Evan O. Kane. Theory of Tunneling. *Journal of Applied Physics*, 32(1) :83–91, January 1961. 117
- [157] A. Schenk. Rigorous theory and simplified model of the band-to-band tunneling in silicon. *Solid-State Electronics*, 36(1) :19–34, January 1993. 117
- [158] C. A. Parker, J. C. Roberts, S. M. Bedair, M. J. Reed, S. X. Liu, and N. A. El-Masry. Determination of the critical layer thickness in the InGaN/GaN heterostructures. *Applied Physics Letters*, 75 :2776, 1999. 125, 126

-
- [159] M. J. Reed, N. A. El-Masry, C. A. Parker, J. C. Roberts, and S. M. Bedair. Critical layer thickness determination of GaN/InGaN/GaN double heterostructures. *Applied Physics Letters*, 77(25) :4121–4123, 2000. 125, 126
- [160] Chi-Kuang Sun, Shih-Wei Chu, Shi-Peng Tai, Stacia Keller, Umesh K. Mishra, and Steven P. DenBaars. Scanning second-harmonic/third-harmonic generation microscopy of gallium nitride. *Applied Physics Letters*, 77(15) :2331–2333, 2000. 128
- [161] Hari Singh Nalwa. *Silicon-based material and devices, two-volume set : materials and processing, Properties and Devices*, volume 1. Academic Press, 2001. 128
- [162] Hellmut Fritzsche. *Amorphous Silicon and Related Materials : (In 2 Parts)*, volume 1. World Scientific, 1989. 129
- [163] M. E. Lin, Z. Ma, FYI Huang, Z. Fo Fan, L. H. Allen, and H. Morkoc. Low resistance ohmic contacts on wide band-gap GaN. *Applied Physics Letters*, 64(8) :1003–1005, 1994. 134
- [164] Jong Kyu Kim, Jong-Lam Lee, Jae Won Lee, Hyun Eoi Shin, Yong Jo Park, and Taeil Kim. Low resistance Pd/Au ohmic contacts to p-type GaN using surface treatment. *Applied Physics Letters*, 73(20) :2953–2955, 1998.
- [165] Jin-Kuo Ho, Charng-Shyang Jong, Chien C. Chiu, Chao-Nien Huang, Chin-Yuen Chen, and Kwang-Kuo Shih. Low-resistance ohmic contacts to p-type GaN. *Applied Physics Letters*, 74(9) :1275–1277, 1999. 134
- [166] June O. Song, Jun-Seok Ha, and Tae-Yeon Seong. Ohmic-contact technology for GaN-based light-emitting diodes : Role of p-type contact. *IEEE transactions on electron devices*, 57(1) :42–59, 2010. 134
- [167] H. K. Cho, T. Hossain, J. W. Bae, and I. Adesida. Characterization of Pd/Ni/Au ohmic contacts on p-GaN. *Solid-state electronics*, 49(5) :774–778, 2005.
- [168] Ja-Soon Jang, Seong-Jin Sohn, Donghwan Kim, and Tae-Yeon Seong. Formation of low-resistance transparent Ni/Au ohmic contacts to a polarization field-induced p-InGaN/GaN superlattice. *Semiconductor science and technology*, 21(5) :L37, 2006.
- [169] Y. W. Kwon, I. C. Ju, S. K. Kim, Y. S. Choi, M. H. Kim, S. H. Yoo, D. H. Kang, H. K. Sung, K. Shin, and C. G. Ko. Nano-Scaled Pt/Ag/Ni/Au Contacts on p-type GaN for Low

Contact Resistance and High Reflectivity. *Journal of nanoscience and nanotechnology*, 11(7) :6157–6161, 2011. 134

Liste des publications

1. Abdoulwahab Adaine, Sidi Ould Saad Hamady, Nicolas Fressengeas. Effects of structural defects and polarization charges in InGaN-based double-junction solar cell. *Superlattices and Microstructures*, Elsevier, 2017, vol. 107, p. 267-277.
2. Abdoulwahab Adaine, Sidi Ould Saad Hamady, Nicolas Fressengeas. Simulation study of a new InGaN p-layer free Schottky based solar cell. *Superlattices and Microstructures*, Elsevier, 2016, 96, pp.121-133.
3. Sidi Ould Saad Hamady, Abdoulwahab Adaine, Nicolas Fressengeas. Numerical simulation of InGaN Schottky solar cell . *Materials Science in Semiconductor Processing*, Elsevier, 2016, 41, pp.219-225.
4. Sidi Ould Saad Hamady, Abdoulwahab Adaine, Nicolas Fressengeas. Cellules solaires en couches minces semi-conductrices en nitrure d'indium et de gallium (InGaN) : potentiel, limites et perspectives. *Workshop Matériaux pour l'Optique et Photonique*, Oct 2017, Nancy, France.
5. Abdoulwahab Adaine, Sidi Ould Saad Hamady, Nicolas Fressengeas. New Optimized InGaN Metal-IN Solar Cell. *China France Second Workshop on Advanced Materials*, Aug 2016, Metz, France.
6. Abdoulwahab Adaine, Sidi Ould Saad Hamady, Nicolas Fressengeas. Comparative study of of PN, PIN and new Schottky based InGaN thin films solar cells. *Nanotech France 2016*, Jun 2016, Paris, France.
7. Adaine Abdoulwahab, Sidi Ould Saad Hamady, Nicolas Fressengeas. Effect of Interface Properties on the Electrical Characteristics of InGaN-based Multijunction Solar Cell. *ICNS 12 - 12th International Conference on Nitride Semiconductors*, Jul 2017, Strasbourg, France.
8. Adaine Abdoulwahab, Sidi Ould Saad Hamady, Nicolas Fressengeas. Influence of defect and polarization on efficiency of InGaN-based double-junction solar cell. *Compound Semiconductor Week 2017*, May 2017, Berlin, Germany.
9. Adaine Abdoulwahab, Sidi Ould Saad Hamady, Nicolas Fressengeas. Multivariate numerical optimization of an InGaN-based hetero junction solar cell. *The Euro-TMCS II : Theory, Modelling and Computational Methods for Semiconductors*, Dec 2016, Cork, Ireland.

Curriculum vitæ

Abdoulwahab ADDAINE

✉ 5 rue du Limousin
57070 Metz
☎ 07 50 25 58 77
@ abdoulwahab.adaine@univ-lorraine.fr

<https://cv.archivesouvertes.fr/abdoulwahab-adaine>

Compétences

- ✓ Simulations, optimisations mathématiques et caractérisations de cellules solaires, Enseignement
- ✓ Logiciels : ATLAS/Silvaco, Sage/Scipy, Python, LabVIEW
- ✓ Matériaux III-V
- ✓ Travail en équipe et en collaboration avec d'autres laboratoires
- ✓ Rédaction des rapports et des travaux de recherches
- ✓ Système d'exploitation : maîtrise de Linux (CentOS)

Langues

- ☞ Swahili : Langue maternelle.
- ☞ Français : Courant.
- ☞ Anglais : Niveau intermédiaire.

Centres d'intérêts

- ☞ Passionné des débats de sociétés et de la nature.
- ☞ Sports de compétition : football, handball.

Formations et diplômes

LMOPS - Université de Lorraine | 2014 – 2018

Thèse de doctorat (Physique - Sciences des Matériaux)

Titre : *Optimisation numérique des cellules solaires à très haut rendement à base de semi-conducteurs III-N.*

Objectifs : Simulation et optimisation de différentes structures de cellules solaires à base d'InGaN. Concevoir et étudier de nouvelles structures. Simulation basée essentiellement sur des mesures expérimentales, associée à une nouvelle approche d'optimisation (optimisation multivariée) des cellules solaires.

Ecole Doctorale : EMMA - Energie Mécanique et Matériaux

Début de thèse : Le 01 octobre 2014

Thèse soutenue : Le 06 juillet 2018

Directeurs :

Pr Nicolas Fressengeas : nicolas.fressengeas@univ-lorraine.fr

Dr Sidi Ould Saad Hamady: sidi.hamady@univ-lorraine.fr

Aix-Marseille Université | 2013 – 2014

Master 2, Microélectronique et Nanoélectronique (MINELEC), Spécialité Dispositifs de la Nanoélectronique, mention Bien.

Aix-Marseille Université | 2012 – 2013

Master 1, Microélectronique et Nanoélectronique, Obtenue avec une mention Bien.

Expériences professionnelles

Enseignement | 2015- 2017 (IUT Génie mécanique de Metz)

Encadrement de travaux pratiques de Motorisation.
Participations à des projets de tutorat.

Enseignement | 2017- 2018 (Université de Lorraine)

Attaché temporaire d'enseignement et de recherche (A.T.E.R.) à l'UFR SCIFA.

Responsabilité | 2015- 2017

Représentant des doctorants du LMOPS à l'école doctorale EMMA.

Stage ingénieur | Mar-Sept 2014

Développement de cellules solaires miniatures pour applications embarquées au CEA-LETI Minattec (Grenoble). Etude de la faisabilité d'un microsystème autonome, en utilisant des cellules photovoltaïques miniaturisées par un découpage au laser.

Stage M1 | Avr-Juin 2013

Etudes de la fiabilité de mémoire non-volatile de type EEPROM à l'Institut Matériaux Microélectronique Nanosciences de Provence (IM2NP) dans l'équipe « Mémoires » (Marseille).

Conférences internationales

☞ Workshop Matériaux pour l'Optique & Photonique, Nancy | Octobre 2017

Oral: Cellules solaires en couches minces semi-conductrices en nitrure d'indium et de gallium (InGaN) : potentiel, limites et perspectives.

☞ ICNS 12 - 12th International Conference on Nitride Semiconductor, Strasbourg | juillet 2017

Poster: Effect of Interface Properties on the Electrical Characteristics of InGaN-based Multijunction Solar Cell.

☞ Compound Semiconductor Week (CWS), Berlin | Mai 2017

Poster: Modeling and optimization of InGaN-based double-junction solar cell.

☞ The Euro-TMCS II: Theory, Modelling and Computational Methods for Semiconductors, Cork, Ireland | Décembre 2016

Poster: Multivariate numerical optimization of an InGaN-based hetero junction solar cell.

☞ China France Second Workshop on Advanced Materials, Metz | Août 2016

Oral: New Optimized InGaN Metal-IN Solar Cell.

☞ Nanotech France 2016, Paris | Juin 2016

Oral: Comparative study of of PN, PIN and new Schottky based InGaN thin films solar cells.

☞ Séminaire de l'école doctorale EMMA, Nancy | Mai 2016

Poster: Simulation et Optimisation d'une cellule solaire Schottky à base d'InGaN

Article dans une revue

- [1] Sidi Ould Saad Hamady, Abdoulwahab Adaine, Nicolas Fressengeas. Numerical simulation of InGaN Schottky solar cell. *Materials Science in Semiconductor Processing*, Elsevier, 2016.
« Dans cet article, nous avons fait une simulation numérique complète d'une cellule solaire Schottky à base d'InGaN. Une nouvelle approche d'optimisation mathématique basée sur des algorithmes d'optimisations multivariées rigoureuses, est utilisée pour trouver les paramètres géométriques et physiques optimaux qui donnent le meilleur rendement de la cellule. »
- [2] Abdoulwahab Adaine, Sidi Ould Saad Hamady, Nicolas Fressengeas. Simulation study of a new InGaN p-layer free Schottky based solar cell. *Superlattices and Microstructures*, Elsevier, 2016
« Dans cet article, nous avons fait une étude de comparaison entre des structures cellules solaires PN et PIN avec d'autres structures cellules solaires sans couches P (Structures Schottky et MIN). Les structures ont été optimisées en utilisant des méthodes d'optimisations multivariées rigoureuses pour optimiser simultanément les principaux paramètres physiques et géométriques des structures des cellules solaires. Nous avons aussi réalisé une étude de tolérance sur les différents paramètres des cellules. »
- [3] Abdoulwahab Adaine, Sidi Ould Saad Hamady, Nicolas Fressengeas. Effects of structural defects and polarization charges in InGaN-based double-junction solar cell.
« Dans cet article, nous avons regardé les effets de la polarisation et des défauts structuraux dans une structure de cellule solaire double-jonction à base d'InGaN. »

Formations et activités scientifiques

✦ Formation : Euro-TMCS II - University college Cork, Ireland.

Obtention d'une bourse pour suivre une formation sur les méthodes de calcul les plus utilisées pour la modélisation des composants semi-conducteurs, destinée spécifiquement aux doctorants et chercheurs débutants,

✦ Cours Ecole Doctorale : Energies pour le futur, quels potentiels ?

Objectif : Ce cours a pour objectif de dresser un bilan des potentiels actuels et futurs des différentes sources d'énergie : fossiles, nucléaires, et renouvelables.

✦ Cours Ecole Doctorale : Introduction aux simulations numériques

Objectif : L'objectif de ce module est d'apporter à l'étudiant les quelques éclairages et briques élémentaires nécessaires à l'approche du monde de la simulation numérique : de l'usage de l'environnement des systèmes et réseaux de type Unix/Linux, jusqu'aux algorithmes de modélisation usuels, en passant par la présentation de deux langages de calcul (Fortran77/95 et C/C++).

✦ Doctoriales de Lorraine -DocLor (Cap France, La Bolle, Vosges)

Objectif : Mettre en œuvre un projet innovant, identifier ses potentialités, valoriser ses compétences, communiquer et présenter ses projets, valoriser ses travaux pratiques et travailler en équipes interdisciplinaires et internationales.

- Présentation d'un poster : « Des panneaux Solaires Haut Rendement ».
- Obtention du 3ème prix du meilleur poster.

Thèmes de recherche

- Simulation de structures cellule solaires.
- Optimisation multivariée.
- Etude des matériaux III-V (InGaN).
- Les couches minces.

Optimisation numérique de cellules solaires à très haut rendement

L'alliage de Nitrure de Gallium et d'Indium (InGaN) est devenu au cours des dernières années un semi-conducteur important pour la réalisation de composants optoélectroniques, du fait de sa bande interdite modulable en fonction de la composition d'indium, entre 0.7 eV à 3.4 eV. Ceci permet l'absorption d'une grande partie du spectre solaire et fait de l'alliage InGaN un excellent candidat pour la réalisation de cellules solaires multijonctions à très haut rendement. Ce travail de thèse a permis une investigation approfondie sur les performances de différentes structures de cellules solaire à base d'InGaN. Il s'inscrit dans le cadre d'un projet visant à associer des méthodes d'optimisation mathématique multivariée à une démarche rigoureuse de simulation s'appuyant autant que possible sur des modèles et résultats expérimentaux. Il s'agit d'une nouvelle approche qui permet d'étudier les performances des cellules solaires en optimisant simultanément plusieurs paramètres (physiques et géométriques) de la cellule solaire. Nous avons étudié pour cette thèse, différentes structures de cellules solaires à simple jonction, notamment de nouvelles structures sans couche P et avons fait également l'étude d'une structure complexe à double jonction. Ces études nous ont permis d'évaluer les performances optimales que pourraient avoir les cellules à base d'InGaN et seront importantes pour la conception et l'élaboration future de cellules solaires InGaN à haut rendement.

Mots clés : InGaN; Cellule solaire; Photovoltaïque; Simulation; Optimisation.

Numerical optimization of high-efficiency InGaN-based solar cells

In recent years, Gallium Indium Nitride (InGaN) alloy has become a semiconductor of choice for the realization of optoelectronic devices, because of its wide spectral coverage, with a bandgap that can be modulated, by changing the indium composition, between 0.7 eV and 3.4 eV. This allows the absorption of a large part of the solar spectrum and makes the InGaN alloy an excellent candidate for the realization of high efficiency multi-junction solar cells. This thesis work led to a further investigation into the performance of different InGaN-based solar cell structures. It is part of a project aiming to associate mathematical optimization methods with a rigorous simulation process based as much as possible on models and experimental results. This is a new optimization approach that optimizes the performance of solar cells by simultaneously optimizing several parameters (physical and geometrical) of the solar cell. We have studied for this thesis, different structures of single junction solar cells, including new structures without P layer and we have also studied a complex structure with double junction. These studies allowed us to evaluate the optimal performance that InGaN-based solar cells can achieve for their design and future development.

Keywords : InGaN; Solar cell; Photovoltaic; Simulation; Optimization.