



Université de Batna 2 – Mostefa Ben Boulaïd
Faculté de Technologie
Département d'Electronique



Thèse

Préparée au sein du Laboratoire d'Electronique Avancée (L.E.A.)

Présentée pour l'obtention du titre de :
Docteur en Sciences en Electronique
Option : Micro-Electronique

Sous le Thème :

**CONTRIBUTION À L'AMELIORATION DU
RENDEMENT DE CELLULE SOLAIRE À
HETEROSTRUCTURES**

Présentée par :

M^{me} KACHA Kalinka

Devant le jury composé de :

M. Ramdane MAHAMDI	Prof.	Université de Batna	Président
M. Fayçal DJEFFAL	Prof.	Université de Batna	Rapporteur
M. Abdelhamid BENHAYA	Prof.	Université de Batna	Co-Rapporteur
M. Hachemi BOURIDAH	Prof.	Université de Jijel	Examineur
M. Fouad KERROUR	Prof.	Université de Constantine	Examineur
M. Salah NEMOUCHI	MCA	Université de Constantine	Examineur

Année 2018

Remerciements

Ce travail de thèse a été effectué au sein du Laboratoire d'Electronique Avancée (L.E.A.) à l'Université Mostafa BenBoulaid BATNA 2.

Je tiens à exprimer ma gratitude au Professeur DJEFFAL Fayçal pour la confiance qu'il m'a accordée en acceptant d'être mon directeur de thèse. Pour son esprit créatif, ses idées innovantes, son ingéniosité, sa compréhension, sa patience et le temps qu'il m'a accordé tout au long de cette étude. Je lui suis redevable de tous ces résultats.

Je voudrais ensuite exprimer ma sincère reconnaissance envers le Professeur BENHAYA Abdelhamid, mon codirecteur de thèse, qui m'a fait confiance et sans qui, la partie expérimentale n'aurait jamais pu voir le jour. Ses compétences, sa motivation, sa rigueur et son enthousiasme ont été pour moi une fortune.

J'adresse mes vifs remerciements au Professeur MAHAMDI Ramdane d'avoir accepté de présider le jury de soutenance de cette thèse et d'avoir accepté d'évaluer ce modeste travail.

Pour l'honneur qu'il m'a accordé, en acceptant d'examiner mon travail de thèse, je remercie chaleureusement Monsieur BOURIDAH Hachemi, Professeur à l'université Mohamed Seddik Ben Yahia de Jijel.

Je tiens à exprimer toute ma reconnaissance à Monsieur KERROUR Fouad, Professeur l'université frères Mentouri Constantine 1, d'avoir accepté de consacrer de son temps et de son effort pour lire et évaluer ce manuscrit.

Mes remerciements vont aussi à Monsieur NEMOUCHI Salah maitre de conférence classe A à l'université Frères Mentouri Constantine 1, de m'avoir fait l'honneur d'être examinateur et de participer au jury de cette thèse.

Je désirerais aussi adresser des remerciements tout particuliers à l'assistance du Docteur BENDJERAD Adel pour le bon déroulement des différentes étapes de déposition des couches minces, au sein de la salle blanche de l'université MBB Batna 2.

Je remercie également monsieur FERHATI Hichem qui a participé à l'avancement de cette thèse, par son apport concernant l'utilisation du simulateur 2D SILVACO.

Résumé

Ce travail de thèse porte sur l'amélioration du rendement de cellule solaire à hétéro-structures dans le but d'affermir le rapport rendement/cout des photovoltaïques. Nous avons mis en évidence des techniques distinctes, intervenant au niveau de la structure de la cellule solaire afin d'augmenter le rendement de photo-conversion. L'insertion des multi-tranches de type p-a-SiGe:H dans la zone intrinsèque i-a-SiGe:H apporte de très bon résultats au niveau des paramètres électriques et par conséquent un impact positif sur le rendement de photo-conversion, suivi par la seconde technique qui se présente par l'utilisation de la couche intrinsèque en SiGe à fraction molaire graduelle, afin d'éviter les effets de dégradation causés par les défauts d'interface. La troisième technique concerne le piégeage de la lumière à travers l'ajout de nanoparticules d'argent de formes sphériques à l'intérieure de la couche active afin d'avoir une meilleur absorption, grâce à l'exploitation de l'effet plasmonique. La dernière étape se présente via l'élaboration d'une hétéro-structure d'une cellule solaire à faible cout, moins de procédés technologiques et moins de couches pour une stabilité électrique et thermique qui se reflète sur les performances du dispositif.

Abstract

The main objective of this thesis is to improve the hetero-structure solar cell efficiency in order to increase the efficiency/cost ratio for photovoltaic applications. To do so, several new techniques are proposed by modifying the solar cell structure in order to enhance its efficiency. The insertion of multi-tranche regions p-a-SiGe:H in the active layer provides improved electrical parameters, which leads to an increased power conversion efficiency. The second proposed technique is based on the introduction of a new intrinsic layer with a gradual molar fraction profile in order to overcome the interface traps-related degradation. The third proposed technique is based on the light trapping technique by introducing silver nanoparticles to generate the plasmonic effects at the interface. The last part of this thesis focuses on the elaboration of a low cost hetero-structure solar cell by reducing the number of elaboration steps and active layers for thermally reliable and high performance devices.

ملخص

الهدف من هذه الرسالة هو تحسين فعالية وأداء الخلية الشمسية متعددة البنية من اجل الحصول على نسبة محسنة لـ (فعالية / الثمن) من اجل تطوير الخلايا الشمسية، في هذا السياق قمنا بادخال تقنيات جديدة وذلك بتغيير بنية الخلية من اجل تضخيم المردود الكهروضوئي، إن إدماج الشرائح رباعية الشكل من نوع p-a-SiGe:H في المنطقة الجوهرية (عديمة التشويب) i-a-SiGe:H قد سمح لنا بتحسين العوامل الكهربائية والكهروضوئية للخلية الذي يسمح بدوره بتضخيم المردود الكهروضوئي، التقنية الثانية التي تم طرحها في هذه الرسالة تعتمد على استعمال شرائح ال SiGe بتدرج الكسر المولاري وذلك من اجل تحسين تأثير التراجع الكهربائي للخلية المعتمد على وجود الشوائب، التقنية الثالثة تعتمد على حصر الإشعاع الضوئي بإضافة جزئيات نانو مترية فضية كروية الشكل داخل الشريحة الفعالة وذلك من اجل تحسين خاصية الامتصاص الضوئي بالاعتماد على التأثير البلازموني.

الجزء الأخير من هذه الرسالة يهدف الى تطوير خلية شمسية متعددة الشرائح النصف ناقلة غير مكلفة من وجهة نظر عدد الشرائح المنخفض والطرائق التكنولوجية المستعملة لتطوير هذه الخلية المستقرة حراريا وعالية الجودة.

Table des matières

Remerciements	i
Résumé	ii
Abstract	iii
<i>ملخص</i>	iv
Table des matières	v
Table des figures	viii
Liste des tableaux	xi
Liste des symboles	xiv
Introduction générale	1

Chapitre I

Etat de l'art sur le photovoltaïque

I.1. Introduction	5
I.2. Développement technologique des cellules solaire	5
I.2.1. Cellule solaire de première génération	6
I.2.1.1. Cellule solaire monocristalline	6
I.2.1.2. Cellule solaire poly-cristalline	8
I.2.1.3. Limites technologiques	9
I.2.2. Cellule solaire de seconde génération	10
I.2.2.1. Cellules solaire à couche mince : silicium amorphe	11
I.2.2.2. Cellules solaire à couche mince : au tellure de cadmium (CdTe)	16
I.2.2.3. Cellules à base de Séléniure de cuivre et d'indium (CIS) et le Séléniure de cuivre et d'indium gallium (CIGS)	17
I.2.3. Cellules solaire de troisième génération	21
I.2.3.1 Cellules solaire organiques (OPV)	21
I.2.3.2. Cellules à pigments photosensible DSSC (Dye sensitized solar cells)	23
I.2.3.3. Cellule solaire Pérovskite	25
I.3. Conclusion	27

Chapitre II

Cellules solaires à hétérojonctions de SiGe en multi-tranches

II.1. Introduction	29
II.2. Cellule solaire mono-jonction en couches minces à base de SiGe	30
II.3. Cellule solaire double jonction en couches minces à base de a:SiGe	31

II.4. Cellule solaire triple jonction en couches minces à base de a:SiGe	32
II.5. Etude numérique	33
II.6. Résultats et interprétation	34
II.7. Conclusion	44

Chapitre III

Impact des défauts d'interface de l'hétéro-structure SiGe/Si

III.1. Introduction	46
III.2. Première partie : Etude numérique de l'hétéro-structure SiGe/Si incluant les défauts d'interfaces pour des applications photovoltaïques.	47
III.2.1. Structure proposée et simulations numériques	48
III.2.2. Résultats et interprétations	50
III.3. Seconde partie : Le rôle du profil de concentration de Ge non-uniforme dans l'amélioration du rendement des cellules solaires à hétérojonction basées sur leSiGe/Si	53
III.3.1. Principe de l'approche proposée	54
III.3.2. Présentation et interprétation des résultats	57
III.4. Conclusion	62

Chapitre IV

Optimisation des performances optiques des cellules solaires à hétérojonctions

IV.1. Introduction	65
IV.2. Effet plasmon des nanoparticules	66
IV.2.1. Le milieu environnant	68
IV.2.2. La nature des nanoparticules	68
IV.2.3. La forme et la taille des nanoparticules	69
IV.2.4. La densité des nanoparticules	69
IV. 3. Modélisation numérique	70
IV.4. Résultats et discussions	73
IV.4.1. Optimisation de la performance optique des cellules solaires à hétéro-jonction à base de ZnO / p-Si	76
IV.5. Conclusion	80

Chapitre V

Elaboration d'hétéro-structures à base de métal/TCO/p-Si

V.1. Introduction	82
V.2. Aspects expérimentaux et caractérisation électrique	83
V.2.1. Expérience	84
V.2.2. Pulvérisation cathodique magnétron RF (MOORFIELD MiniLab 060)	85
V.2.3. Caractérisation électrique	87
V.2.4. Extraction des paramètres FoMs	88
V.3. Résultats et discussion	89
V.3.1. Analyse de la stabilité thermique des SBDs en métal/TCO/p-Si fabriqués	90
V.4. Conclusion	96
Conclusion générale	98
Bibliographie	101
Annexes	113
Travaux publiés	124

Table des figures

Figure I.1 : Développement des technologies des cellules solaires [6].	5
Figure I.2 : Les étapes technologiques des cellules solaires à base de silicium [7].	6
Figure I.3 : Schémas de différentes structures de cellules solaires cristallines. (a) PERL. (b) HIT. (c) BC-BJ. (d) IBC (Interdigitated back-contact cell). (e) BCC (Buried contact cell) [12].	8
Figure I.4 : Structure de cellule solaire à contact sur la face arrière. (a) MWT. (b) EWT [16].	9
Figure I.5 : Principales pertes intrinsèques pour une cellule photovoltaïque en silicium. (1) Pertes des photons de grandes longueurs d'onde. (2) Pertes dues à l'énergie excédentaire des photons. A droite, on a illustré le phénomène de thermalisation [17].	10
Figure I.6 : Comparaison des coefficients d'absorption du a-Si:H et c-Si [20].	12
Figure I.7 : Densité des états d'électrons dans a-Si: H, ainsi que les queues de bande et les états intermédiaires en raison de défauts [21].	12
Figure I.8 : Structures des cellules solaires a-Si:H (a) Structure de substrat en verre avec éclairage à travers le substrat. (b) Structure de substrat en acier inoxydable avec illumination directe à travers la couche conductrice transparente [22].	14
Figure I.9 : Structure de cellule solaire tandem sur substrat de verre [24].	15
Figure I.10 : Structure de la cellule solaire CdTe/CdS montrant également les grains CdTe.	17
Figure I.11 : Structure d'une cellule solaire à base de CIGS [27].	18
Figure I.12 : Coefficient d'absorption optique α en fonction de l'énergie E des photons incidents dans le CIS et le Si [30].	19
Figure I.13 : Rendement quantique externe de la cellule standard CIGS ayant un gap de 1.12eV. Les zones numérotées représentent les différentes pertes optiques et électroniques dans le dispositif. La ligne verticale pointillée correspond au gap du CIGS [31].	20
Figure I.14 : Les cinq étapes du mécanisme de générations et de collection des charges libres dans une cellule solaire organique [32].	21
Figure I.15 : Un photon d'énergie $h\nu$ génère un exciton qui se sépare en un polaron positif et négatif. Les charges sont ensuite collectées au niveau des électrodes [33].	22
Figure I.16 : Schéma illustrant le principe de fonctionnement d'une cellule DSSC [39].	24
Figure I.17 : a) Structure de la pérovskite ABX ₃ . Applications en photovoltaïque $A^+ = CH_3NH_3^+$, $B^{2+} = Pb^{2+}$, $X^- = I^-$. b) XRD spectre d'une couche mince de pérovskite [42].	25
Figure I.18 : Spectre de photoluminescence et d'absorption des couches minces en MAPbI ₃ .	26

Figure I.19 : Différentes architectures des cellules solaires Pérovskites [49].	27
Figure II.1 : Coupe transversale de la cellule solaire étudiée en a-SiGe:H à couche mince	30
Figure II.2 : Coupe transversale de la cellule solaire double-jonction en couches minces à base de SiGe étudiée.	32
Figure II.3 : Coupe transversale de la cellule solaire triple jonction en couches minces amorphe à base de SiGe proposée.	33
Figure II.4 : Variation du rendement des cellules solaires en fonction de (a) la concentration du dopage, (b) la largeur et (c) de l'épaisseur de la tranche.	37
Figure II.5 : Variation du rendement des cellules solaires étudiées en fonction du nombre de tranches selon les trois cas étudiés : (a) mono-jonction, (b) double-jonction et (c) triple-jonction.	39
Figure II.6 : Caractéristiques I-V des cellules solaires à multi-tranches optimisées par rapport aux cellules solaires conventionnelles : (a) mono-jonction et (b) double-jonction.	42
Figure III.1 : Coupe transversale de la cellule solaire hétéro-structure à base de SiGe/Si proposée.	49
Figure III.2 : Courbes caractéristique I-V pour différentes valeurs de densité de défaut d'interface.	50
Figure III.3 : Circuit électrique équivalent de la cellule solaire (a) avant l'implantation de notre modèle et (b) après l'implantation du modèle de la dégradation.	51
Figure III.4 : Approche proposée pour l'optimisation du circuit photovoltaïque.	52
Figure III.5 : Vue de la coupe transversale de la cellule solaire hétéro-structure à base de SiGe/Si avec fraction molaire graduelle en Ge	55
Figure II.6 : Profile de la fraction molaire graduelle en Ge dans le film absorbeur du SiGe	55
Figure III.7 : Caractéristiques I-V de la structure solaire à hétérojonction à base de SiGe/Si avec et sans défauts d'interface comparée à la structure proposée avec la fraction molaire graduelle en Ge (sans défauts d'interface) avec $t_{\text{SiGe}}=50\text{nm}$, $N_{\text{SiGe}}=4.10^{16}\text{cm}^{-3}$, $N_{\text{f}}=10^{13}\text{cm}^{-3}$ and $x_{\text{SiGe}}=20\%$.	58
Figure III.8 : Caractéristiques I-V de la cellule solaire à base de SiGe/Si avec et sans défauts d'interface comparée à la conception proposée associer aux différents profils de la fraction molaire du Ge, avec $t_{\text{SiGe}}=50\text{nm}$, $N_{\text{SiGe}}=10^{15}\text{cm}^{-3}$ et $x_{\text{SiGe}}=20\%$.	59
Figure III.9 : Rendement de conversion des deux cellules solaires basées sur le SiGe/Si avec la fraction molaire de Ge graduelle et la conception conventionnelle en fonction de l'épaisseur de la couche du SiGe avec $x_{\text{min}}=0$, $x_{\text{max}}=100\%$, $N_{\text{SiGe}}=10^{15}\text{cm}^{-3}$ et $N_{\text{p-Si}}=5.10^{17}\text{cm}^{-3}$.	60
Figure IV.1 : Principaux paramètres influençant la position de la RPSL [102].	68

- Figure IV.2** : Coupe transversale des cellules solaires à hétérojonction à base de n-ZnO/p-Si : a) structure conventionnelle, b) conception proposée avec texturation d'interface en même temps que l'adjonction des nanoparticules d'Ag. 69
- Figure IV.3** : Courbes d'absorbance en fonction de la longueur d'onde sur tout l'étendue de l'ensemble du spectre électromagnétique ; pour la conception conventionnelle, auprès des conceptions incluant la texturation d'interface et les nanoparticules d'Ag, avec $h=100\text{nm}$, $w=100\text{nm}$, $R=20\text{nm}$ et $P=100\text{nm}$. 72
- Figure IV.4** : Le profil de champ électrique de : (a) la conception conventionnelle comparé à celui de la conception proposée comprenant (b) une texturation d'interface, (c) des nanoparticules d'Ag et (d) les deux en même temps, pour une longueur d'onde spécifique ($\lambda = 500\text{nm}$), avec $t_z=150\text{ nm}$, $t_a=20\text{ nm}$ et $t_{si}=500\text{nm}$. 73
- Figure IV.5** : (a) L'absorbance en fonction de la longueur d'onde pour la cellule solaire à base de n-ZnO/p-Si proposée incluant la texturation d'interface et les nanoparticules d'Ag avec et sans optimisation à l'égard de la conception conventionnelle. (b) Répartition du champ électrique de la conception optimisée. 76
- Figure V.1** : Schéma proposée de l'hétéro-structure de SBD à base de métal/TCO/p-Si. 84
- Figure V.2** : Principe de pulvérisation cathodique magnétron RF 86
- Figure V.3** : Pulvérisateur cathodique MiniLab 060 87
- Figure V.4** : Caractéristique I-V semi-logarithmiques de la conception conventionnelle de la SBD Au/p-Si et de la conception proposée métal/TCO/p-Si à différentes inter-couches (ZnO et ITO) pour $t_{\text{TCO}} = 10\text{ nm}$. 90
- Figure V.5** : Variation du rapport de rectification en fonction de la température pour la conception Au/p-Si conventionnelle et des SBDs à base de Si proposés avec des inter-couches de TCO. 91
- Figure V.6** : Variation à la fois du facteur d'idéalité et de la SBH en fonction de la température pour les SBD's conventionnelle à base de Au/p-Si et la conception proposée à hétéro-structure Al/ZnO/p-Si. 92
- Figure V.7** : Variation des résistances série et shunt en fonction de la température de la (a) SBD conventionnelle à base de Au/p-Si, (b) conceptions proposées à différentes inter-couches de TCO (ZnO et ITO) avec $t_{\text{TCO}} = 10\text{nm}$. 93
- Figure V.8** : Comparaison des paramètres FoMs de stabilité thermique proposés des SBDs conventionnelles à base de Au/p-Si et les modèles proposés comprenant les inter-couches de TCO. 94

Liste des tableaux

Tableau II.1 : Valeurs des paramètres optimisées des cellules solaires proposées.	40
Tableau II.2 : Performances optimisées des cellules solaires proposées : (a) mono-jonction, (b) double-jonction, (c) triple-jonction.	43
Tableau III.1 : Les valeurs des paramètres de conception utilisées pour la simulation numérique ($N_f=10^{12} \text{ cm}^{-3}$).	49
Tableau III.2 : Paramètres de conception de cellule solaire optimisés ($N_f=10^{12} \text{ cm}^{-3}$).	52
Tableau III.3 : Valeurs des paramètres de conception utilisées pour la simulation numérique.	57
Tableau III.4 : Comparaison globale des performances des cellules solaires à base de SiGe/Si entre la conception conventionnelle et la conception proposée, y compris l'aspect de la fraction molaire graduelle.	62
Tableau IV.1 : Comparaison des performances optiques globales entre la cellule solaire conventionnelle à base de n-ZnO/p-Si et la conception proposée en tenant compte de la texturation de l'interface et en présence de nanoparticules d'Ag avec ou sans optimisation.	77
Tableau V.1 : Comparaison globale des indicateurs de performance entre les SBDs conventionnelles à base de Au/p-Si et les modèles proposés avec les différentes hétéro-structures (Au/ITO/p-Si et Al/ZnO/p-Si).	95

Liste des symboles

a : Paramètre d'ajustement.

Al : Aluminium.

AR : Antireflet.

Au : Or.

$A(\lambda)$: L'absorbance moyenne.

BC-BJ : Back contact-back junction.

BGN : Band gap Narrowing.

BSF : A back surface field contact.

C : La célérité de la lumière dans le vide.

c_1 et c_2 : Les facteurs d'accélération cognitive et sociale.

CZ : The Czochralski method.

DOS : Le modèle de densité d'états (Density Of States).

E : L'intensité du champ électrique.

E_1 : Le champ électrique sur le port 1

E_c : Le champ électrique calculé sur le port, qui se repose sur l'excitation ajoutée au champ réfléchi.

$\vec{E}_z(\vec{r})$: La composante verticale des champs électriques.

EDX : La spectrométrie à dispersion d'énergie (Energy Dispersive X-ray Spectroscopy).

EWT : cellules d'enveloppe d'émetteur (Emitter Wrap Through)

$F(X_i)$: La fonction objectif pour l'optimisation géométrique.

FDTD : La méthode des différences finies dans le domaine temporel (Finite Difference Time Domain).

FoMs : facteurs de mérite (Figures of Merit)

FZ : The float Zone method.

GA : L'algorithme génétique (Genetic Algorithm).

Ge : Germanium.

H : L'intensité du champ magnétique.

H^* : Le conjugué du champ magnétique complexe.

HIT : Heterojunction with Intrinsic Thin layer.

I_{01} et I_{02} : les densités de courant inverse pour les deux diodes.

IBC : Interdigitated Back Contacts.

I_{deg} : le courant de dégradation.

I_{ph0} : Le photo-courant.

I_{phd} : Le photo-courant global (incluant les effets de la dégradation).

ITO : Oxyde d'étain d'indium (Indium Tin Oxide).

$k(w)$: Le coefficient d'extinction

m_0 : La masse effective d'un électron de conduction.

MOGA : L'algorithme génétique à plusieurs objectifs (Multi-Objective Genetic Algorithm).

M/S : métal/semiconducteur

MWT : Cellules à enveloppement métallique (Metal Wrap Through).

N : La densité volumique d'électron.

n : Facteur d'idéalité.

n, K : Les constantes optiques.

N_f : La concentration de défauts d'interface.

N_{n-Si} : Dopage de la région Si (n^+).

N_{p+-Si} : Dopage de la région Si (P^+).

N_{p-Si} : Dopage de la région Si (P).

N_{SiGe} : Dopage de la région SiGe (n).

N_{SiGe} : La concentration de dopage du film absorbant en SiGe.

OLED : diodes électroluminescentes organiques (Organic Light Emitting Diodes)

PCE : Le rendement de conversion de puissance (the power conversion efficiency).

PERL : Passivated Emitter Rear Locally diffused.

Pt : Platin.

q : La charge d'électron.

r_1 et r_2 : les nombres aléatoires répartis dans la gamme de [0,1].

$R(\lambda)$: La réflectance.

$\text{Re}\{\vec{E}_z(\vec{r}) \times \vec{H}^*(\vec{r})\}$: la partie réelle du vecteur résultant du produit vectoriel des deux composantes électrique et magnétiques de l'onde.

R_p : La résistance parallèle.

R_s : La résistance série.

R_{sh} : la résistance shunt.

SBD : diodes Schottky à barrière (Schottky Barrier Diodes).

SBH : hauteur de la barrière Schottky (Schottky Barrier Height)

Si : Silicium.

SRH : Shockley-Read-Hall.

TAE : Le rendement d'absorption totale (Total Absorbance Efficiency)

TCO : Oxyde transparent conducteur (transparent conductive oxide).

t_{n-Si} : Epaisseur de la région Si (n^+).

t_{p^+-Si} : Epaisseur de la région Si (P^+).

t_{p-Si} : Epaisseur de la région Si (P).

t_{Si} : L'épaisseurs du semi-conducteur de silicium

t_{SiGe} : L'épaisseur de la couche de SiGe.

t_{TCO} : L'épaisseur de couche de TCO.

V : Le volume de la nano bille.

V_i^k : La vitesse de la particule dans l'essaim.

$w_j(j=1,2)$: le coefficient de pondération égal à 1/2.

w_p : La fréquence de résonance des plasmons de volume.

ω_s : La fréquence maximale de l'onde de surface.

X_i^k : La position de la particule dans l'essaim.

x_{Ge} : Fraction molaire de Ge (SiGe (n^+)).

x_{Ge} : La fraction molaire de Ge.

x_{max} et x_{min} : Les limites maximum et minimum de la fraction molaire de Ge.

ZnO : Oxyde de Zinc.

γ : la constante de relaxation.

$\Delta=\nabla^2$: L'opérateur Laplacien

ϵ'' : La partie imaginaire de la constante diélectrique du matériau complexe.

ϵ_0 : la permittivité du vide.

ϵ_1 : La partie réelle de la permittivité.

ϵ_2 : La partie imaginaire.

ϵ_d : La permittivité complexe du milieu diélectrique environnant.

λ (nm) : Longueur d'onde.

μ : la perméabilité et ϵ représente la permittivité du matériau.

σ : la conductivité de la couche mince.

ϕ_b : La hauteur de la barrière de Schottky.

ω_s : La fréquence de résonance plasmonique.

Introduction générale

De nos jours, il est impossible de se passer des énergies, nous les utilisons dans notre quotidien et nous en sommes totalement dépendants. Malheureusement, certaines de ces énergies s'épuisent rapidement et la demande ne cesse de se croître [1]. Il nous faut donc anticiper et trouver d'autres solutions avant qu'elles ne s'éteignent.

Les énergies sont classées en deux catégories : les énergies fossiles dont les sources d'énergies se renouvellent plus lentement que leur consommation, comme c'est le cas du pétrole, et les énergies renouvelables que la nature constitue ou reconstitue plus rapidement que l'homme ne les utilise. Elles peuvent ainsi être considérées comme inépuisables à l'échelle du temps humain. Parmi ces sources, on peut citer le soleil.

L'énergie solaire a des utilisations diverses : exemple d'énergie solaire thermique, lorsqu'il s'agit des rayons de soleil captés pour réchauffer l'eau. C'est typiquement le solaire thermique qui est utilisé dans les chauffe-eaux solaires, déjà présents dans un nombre croissant de logements.

Il existe aussi l'énergie solaire photovoltaïque qui convertit directement le rayonnement du soleil en électricité par l'intermédiaire de panneaux photovoltaïques. Cette énergie, encore sous-utilisée, pourrait réellement révolutionner la totalité du paysage énergétique. Une étude récente [2] a démontrée que 80% des grandes villes du monde pourraient couvrir la totalité de leurs besoins en électricité photovoltaïques. Voilà ce qui augure de grandes avancées pour l'énergie solaire. L'installation de panneaux photovoltaïques, permet de produire localement une électricité durable. On peut alors choisir de revendre la totalité de cette énergie ou opter pour l'autoconsommation et revendre le surplus de production. Dans les deux cas, la production permettra d'obtenir un revenu supplémentaire, à un prix garanti pendant 20 ans.

La technologie de cellules photovoltaïques dominante sur le marché est celle à base de silicium cristallin, avec 90% des ventes au niveau mondial en 2014 [3]. Les meilleurs modules industriels ont depuis 2012 dépassé 20% de rendement et aujourd'hui culminent à 23% de rendement [4].

Le silicium (Si) représente une matière première idéalement adaptée à la production d'énergie fiable et renouvelable par la voie photovoltaïque. Premièrement, il ne présente aucune toxicité connue pour l'homme. Ensuite, il est abondant dans la nature : un quart de la croûte terrestre est constituée de silicium. Par exemple, le sable tel qu'il se trouve sur les

plages, est composé essentiellement de silice ou dioxyde de silicium (SiO_2). Finalement, la propriété électronique essentielle, le «gap» (band gap ou bande interdite) du silicium, d'une largeur de 1,12 eV, est favorable à l'absorption de photons dans la gamme d'énergie visible.

L'idée d'utiliser une technologie «couche mince» a été exploitée depuis les années 1980, et plus particulièrement celle basée sur le silicium amorphe (a-Si), un matériau caractérisé par un gap de mobilité de 1,7 eV. Cependant, de nombreux efforts restent à fournir pour rendre compétitive cette technologie.

Dans une approche de réduction des coûts de production, une voie parallèle a été engagée avec le développement préliminaire datant du milieu des années 1980, de la technologie silicium-germanium (SiGe), dont il répond à ce besoin conjoint de l'économie et des performances, pour les applications terrestres. Elle peut aussi être utile pour la fabrication de modules souples, mieux adaptés aux problématiques de la mobilité et de l'autonomie énergétique.

Les problématiques apportées par ces nouvelles hétéro-structures en couches minces de silicium germanium (SiGe), diffèrent à certains égards de celles retrouvées dans les cellules classiques, autant sur les aspects électroniques et optiques que sur leurs modes de fabrication.

Ce travail de thèse vise donc à explorer et maîtriser les concepts technologiques pour la fabrication de ce type de cellules, ainsi qu'à l'élaboration d'architectures à haut-rendement répondant au critère de réduction des coûts.

Le travail réalisé relate différentes difficultés et solutions exposées à travers cinq chapitres :

Le premier chapitre dresse une description du contexte général dans lequel s'inscrit cette thèse : Le fonctionnement des cellules solaires est présenté, en insistant sur les particularités des différentes générations des cellules solaires à travers leurs évolutions. Les limitations optiques imposées par ces structures sont décrites, avec les solutions technologiques adaptées. La fin de ce chapitre est centrée sur l'importance de la continuité de l'exploitation des cellules solaires de la seconde génération servant de base aux architectures de cellules solaires minces à hétéro-structures conçues dans ce travail de thèse.

Afin d'augmenter le rendement de conversion des cellules solaires à couches minces, il est indispensable de revoir la conception architecturale. Le second chapitre est donc consacré à l'étude et l'optimisation des différentes hétéro-structures à base de SiGe, en débutant par la mono-jonction et en achevant par la triple-jonctions. L'objectif final consiste à améliorer les

caractéristiques électriques qui deviendront plus rentables, grâce à l'impact des modifications introduites au niveau de la couche active sur les performances électriques.

La prise en compte des dislocations issues des procédés de fabrications des couches minces de SiGe, rend le travail de la thèse plus réaliste, dans la suite, le troisième chapitre se subdivise en deux parties. La première partie présente l'impact des défauts d'interfaces souvent présentes dans les hétéro-structures à base de SiGe, ainsi que les effets néfastes qui se répercutent sur la diminution du rendement de conversion, malgré les modifications proposées précédemment. La solution de ce problème sera exposée à travers la seconde partie de ce chapitre. Cela nécessite l'exploitation d'un procédé technologique différent dont le résultat est remarquable.

L'amélioration du rendement de conversion ne s'arrête pas uniquement aux propriétés électriques, un passage obligatoire par le renforcement des propriétés optiques est essentiel afin de poursuivre dans la même voie du progrès, le quatrième chapitre offre une étude basée sur l'optimisation et la modélisation des performances optiques en se basant sur l'utilisation des nanoparticules métalliques et, la texturisation morphologique de l'interface.

Afin de renforcer le travail de thèse, les résultats des travaux expérimentaux viennent compléter les résultats des études précédentes à travers le cinquième chapitre qui se subdivise en deux parties : la première partie met l'accent sur les performances de stabilité électrique et thermique de l'hétéro-structure ITO/Si conçu selon la technologie de la jonction Schottky, largement utilisé dans les dispositifs électroniques de puissance. Dans ce contexte, la seconde partie met en avant le comportement photovoltaïque de cette même structure, ce qui nous conduit vers une ouverture sur des cellules solaires à faible coût « LowCost ».

Le volet expérimental du travail scientifique a été effectué dans les locaux du laboratoire de recherche L.E.A. (Laboratoire d'Electronique Avancée) de l'université Mostafa Ben Boulaid de BATNA 2, au niveau de la salle blanche. Ce travail a été réalisé en partie dans le cadre du projet de recherche dont l'intitulé : « Etude, Modélisation et élaboration des dispositifs électroniques à base de SiGe ».

Chapitre I

Etat de l'art sur le photovoltaïque

I.1. Introduction	5
I.2. Développement technologique des cellules solaire.....	5
I.2.1. Cellule solaire de première génération	6
I.2.1.1. Cellule solaire monocristalline.....	6
I.2.1.2. Cellule solaire poly-cristalline.....	8
I.2.1.3. Limites technologiques	9
I.2.2. Cellule solaire de seconde génération.....	10
I.2.2.1. Cellules solaire à couche mince : silicium amorphe.....	11
I.2.2.2. Cellules solaire à couche mince : au tellure de cadmium (CdTe).....	16
I.2.2.3. Cellules à base de Séléniure de cuivre et d'indium (CIS) et le Séléniure de cuivre et d'indium gallium (CIGS).....	17
I.2.3. Cellules solaire de troisième génération.....	21
I.2.3.1 Cellules solaire organiques (OPV).....	21
I.2.3.2. Cellules à pigments photosensible DSSC (Dye sensitized solar cells).....	23
I.2.3.3. Cellule solaire Pérovskite.....	25
I.3. Conclusion	27

I.1. Introduction

Le Photovoltaïque est une technologie d'énergie solaire qui utilise des cellules solaires ou des panneaux photovoltaïques solaires pour convertir la lumière directement en électricité. Les cellules solaires produisent de l'électricité à courant continu (CC) à partir de la lumière, qui peut être utilisée directement ou par chargement de batteries pour alimenter les équipements. Bien que l'effet photovoltaïque ait été observé pour la première fois en 1839 par Alexandre-Edmond Becquerel, la première cellule solaire moderne a été brevetée par Russel Ohl en 1946. En 1954 Bell Laboratoires a découvert que le silicium dopé avec certaines impuretés était très sensible à la lumière. Cela a marqué le début de l'ère moderne de la technologie de l'énergie solaire. La première application pratique du photovoltaïque a été de piloter des satellites en orbite et d'autres engins spatiaux et calculatrices de poche [5].

Avec le développement technologique, les panneaux solaires deviennent de moins en moins coûteux, ce qui augmente leur utilisation, et pousse les fabricants à produire encore plus pour répondre à la demande.

I.2. Développement technologique des cellules solaire

Basée sur les différentes technologies et les matériaux utilisés, la technologie de la cellule a passé par plusieurs phases, ce qui a conduit à les classer en trois grandes familles, malgré l'apparition d'autres catégories comme il est présenté sur la figure (I.1).

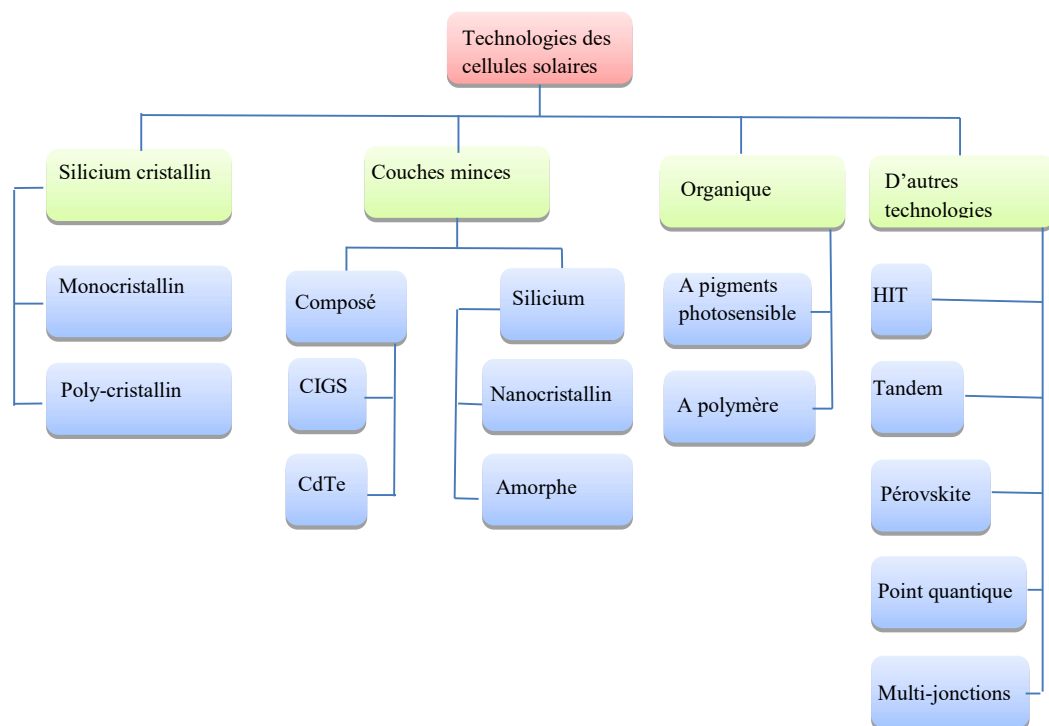


Figure I.1 : Développement des technologies des cellules solaires [6].

I.2.1. Cellule solaire de première génération

A cause de l'abondance du silicium (Si) sur Terre après l'oxygène, qui présente 25,7 % de la croûte terrestre, cependant, cet élément n'est pas directement exploitable puisqu'il n'est pas présent à l'état pur. Il doit donc être extrait de différents minéraux, comme la silice (ou dioxyde de silicium SiO_2), avant d'être exploité. Ce qui fait de la première génération des cellules solaire, fabriquée à partir de ce matériau, la plus dominante sur le marché photovoltaïque avec un taux qui dépasse 86% [7].

En général, les cellules solaires de première génération se subdivisent en deux types distincts. La figure (I.2) montre qu'à partir du niveau de cristallisation, résultant des procédés de fabrication, on a les cellules solaires à base du silicium monocristallin et le silicium polycristallin.

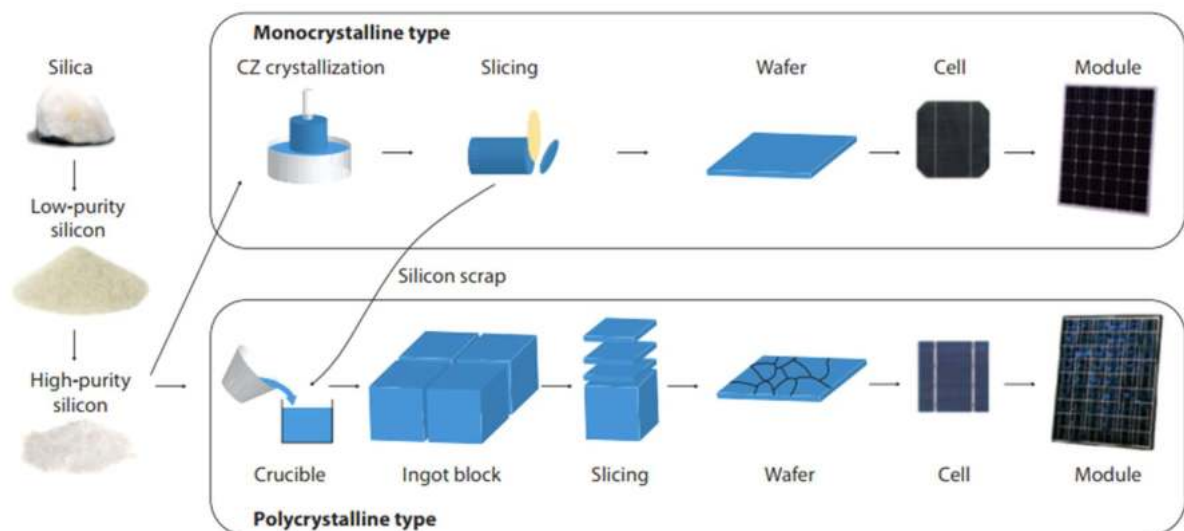


Figure I.2 : Les étapes technologiques des cellules solaires à base de silicium [7].

Pour le silicium monocristallin, le matériau se présente sous la forme d'un cylindre composé d'un seul et unique cristal. Cette structure subit, après sa fabrication, un équarrissage afin que les galettes produites par la suite aient une forme carrée (leurs coins sont cependant arrondis). Dans le cas du silicium multi-cristallin, le matériau est directement refroidi dans une lingotière rectangulaire mais, comme son nom l'indique, il est fait d'un grand nombre de cristaux (ils correspondent aux taches visibles sur le lingot de droite).

I.2.1.1. Cellule solaire monocristalline

Le développement des cellules solaires a dû passer par plusieurs phases, afin d'aboutir à des rendements satisfaisants. Parmi les exemples les plus représentatives, nous citons : la

cellule de type PERL (Passivated Emitter Rear Locally diffused) représentée sur la figure (I.3 (a)), la cellule à hétérojonction avec une jonction intrinsèque dans une technologie HIT (Heterojunction with Intrinsic Thin layer) (figure (I.3 (b))) et la cellule à technologie BC-BJ (Back contact-back junction) (figure I.3 (c)). Notons que ces cellules photovoltaïques présentent de nombreuses technologies qui assurent un haut rendement.

La cellule PERL se caractérise par une texturation en pyramides inversées, une double couche antireflet, une grille de contacts de surface limitée, un émetteur sélectif, une passivation par oxyde thermique, un BSF (Back Surface Field) localisé et un substrat de silicium monocristallin (FZ) de type-p. La durée de vie des porteurs minoritaire dans le substrat (bulk) est plus longue, de l'ordre de 1ms, et les meilleurs valeurs des paramètres de sortie (V_{oc} , J_{sc} , FF et η) obtenus pour ce type de cellule sont respectivement de 706 mV, 42,7 mA cm⁻², 0,828 et 25 % pour une cellule de laboratoire de 4cm² [8].

Le développement des cellules solaires au silicium HIT de la société Sanyo a permis de réduire le coût des cellules solaires HIT, Sanyo se concentre sur la réduction de l'épaisseur de la plaquette de silicium. En 2009, la société a démontré un rendement de conversion de 22,8% et une tension de circuit ouvert record de 0,743 V sur une cellule solaire basée sur une plaquette de 98 μ m d'épaisseur avec une surface totale de 100,3 cm² [9].

La première cellule solaire BC-BJ de 17% de rendement a été présentée par Schwartz et Lammert en 1975. Les cellules solaires conventionnelles BC-BJ ont une grande surface, ce qui entraîne des coûts de matériaux plus élevés. En plus, une cellule solaire de 10 μ m d'épaisseur de silicium, à contact arrière ultra-mince, ayant un rendement de conversion de puissance de 13,7% est rapportée par Jeong et al. en 2013. En outre, des cellules solaires BC-BJ ayant une surface active de 9cm² ont été fabriquées sur des tranches (FZ) de 4 pouces, de 250 μ m d'épaisseur, de type n, avec une résistivité nominale de 3 Ω cm, résultant de 21,5% PCE [10].

La structure à contacts inter-digités sur la face arrière IBC (Interdigitated Back Contacts) (figure (I.3 (d))) a d'abord été développée à l'échelle du laboratoire et sur surface réduite par l'Université de Stanford [11]. Cette structure utilise la technologie de contacts localisés (Point-Contact) et nécessite plusieurs étapes d'alignements par photolithographie. Sun Power Corp. A pu diminuer le nombre d'alignements en simplifiant la structure puis industrialiser sa production sur c-Si de type n sans étape de photolithographie. Des cellules de 148 cm² avec un rendement moyen de 22.4% (max 23.4%) sont fabriquées sur leur ligne de production industrielle. Ces excellents résultats ont été obtenus grâce aux très faibles pertes

optiques et résistives de cette structure. Elles sont toutefois encore limitées par des recombinaisons aux contacts et dans les zones dopées thermiquement.

La cellule solaire « Buried-Contact » développée par l'Université UNSW de Sydney (University of New South Wales, Australie), a été commercialisée par BP Solar sous le nom de « Cellule Saturne ». Le concept consiste dans un premier temps à creuser des sillons sur la face avant de la cellule solaire (texturation de surface), par ablation laser puis par gravure plasma, puis à couler dans ces sillons un matériau conducteur (métallisation par galvanisation) (figure I.3 (e)). Le fait que les sillons soient à la fois très fins et très profonds permet d'augmenter la surface éclairée (donc réduire les pertes d'ombrage) tout en limitant la résistance électrique des pistes conductrices.

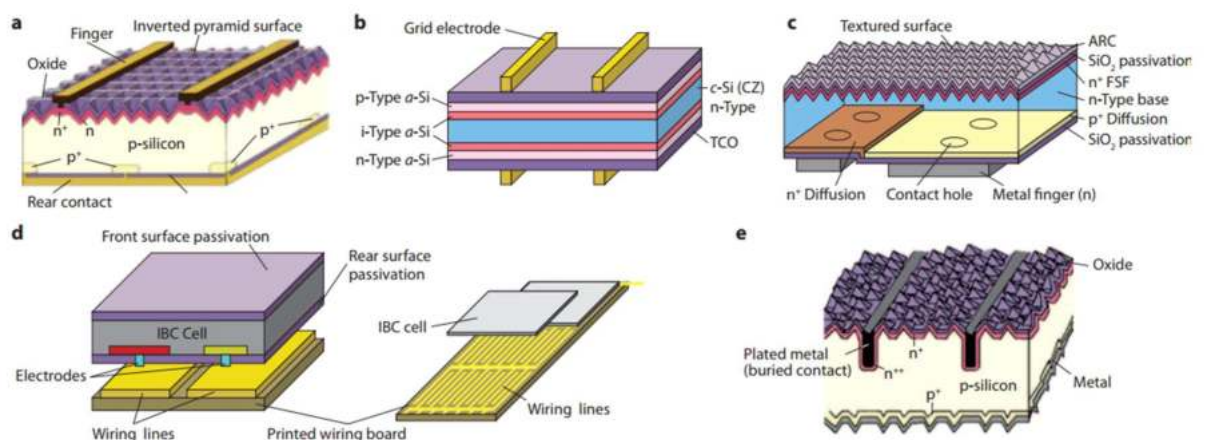


Figure I.3 : Schémas de différentes structures de cellules solaires cristallines. (a) PERL. (b) HIT. (c) BC-BJ. (d) IBC (Interdigitated back-contact cell). (e) BCC (Buried contact cell) [12].

I.2.1.2. Cellule solaire poly-cristalline

Des lingots et des plaquettes de silicium poly-cristallin ont été développés afin de réduire les coûts de production des lingots de silicium cristallin, et ont été étudiés depuis le milieu des années 1970. Les fours poly-cristallins modernes sont conçus pour une productivité maximale d'environ 450kg le lingot.

Les cellules poly-cristallines sont les cellules les plus largement produites, représentant environ 48% de la production mondiale de cellules solaire en 2008. Les cellules industrielles poly-cristallines standards offrent des rendements de 15 à 17%, environ 1% inférieures à celles des cellules monocristallines fabriquées sur les mêmes lignes de production [13].

Les substrats poly-cristallins sont sujets à des taux plus élevés de recombinaison de porteurs minoritaires, à la fois aux limites des grains actifs et dans les grains cristallins en

raison de densités de dislocation et d'impuretés élevées par comparaison avec les substrats monocristallins FZ ou CZ.

De nouveaux types de cellules poly-cristallines à contact arrière (figure I.4 (a)), telles que des cellules à enveloppement métallique MWT (*Metal Wrap Through*) et des cellules d'enveloppe d'émetteur EWT (*Emitter Wrap Through*) (figure I.4 (b)), ont également été développés par des instituts et des sociétés comme ECN, Kyocera et Advent Solar .

Les cellules MWT ne nécessitent qu'un nombre relativement petit de trous traversant pour diriger les électrons photo générés vers la surface arrière à travers, les électrodes métalliques et les émetteurs dopés type-n et produisent des photo-courants de collecte plus élevés en raison de l'absence de la barre de contact (l'électrode principale) sur la surface avant comme dans les cellules conventionnelles. Une valeur élevée du J_{sc} de l'ordre de $37,3 \text{ mAcm}^{-2}$ et un rendement de 18,3% ont été rapportés pour une cellule MWT récente par Kyocera, et le rendement du module MWT par la société ECN, est de l'ordre de 16,4% [14].

Les cellules EWT possèdent un plus grand nombre de trous traversant les espaces-étroits, qui dirigent les électrons photo-générés vers la surface arrière uniquement à travers des émetteurs dopés n. Les cellules EWT produisent des photo-courants encore plus élevés en éliminant l'ombre de la barre de contact avant (électrode principale) et du quadrillage (sous-électrode). Une densité de courant élevée de $37,5 \text{ mAcm}^{-2}$ et un rendement de 17,1% ont été signalés récemment pour les cellules EWT par Q-Cells [15].

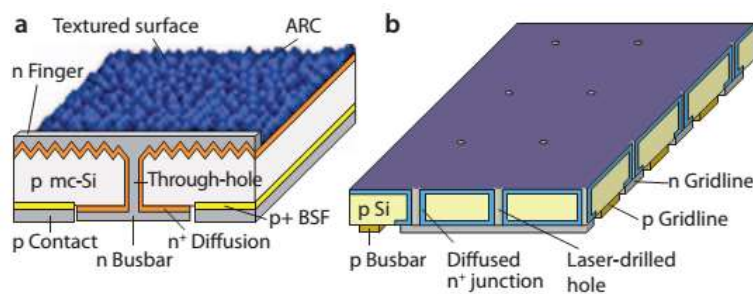


Figure I.4 : Structure de cellules solaire à contact sur la face arrière.

(a) MWT. (b) EWT [16].

I.2.1.3. Limites technologiques

Le coefficient d'absorption du silicium est lié au gap et à la profondeur de la pénétration des photons dans le silicium, donc il faut une épaisseur plus élevée pour une bonne absorption, ce qui implique des cellules plus lourdes et d'autant plus fragiles.

Les cellules solaire de première génération sont capables d'atteindre la limite de Shockley-Queisser, qui est d'environ 31% pour un spectre solaire AM1.5G à $1\,000 \text{ W/m}^2$, correspondant au rendement maximal atteignable dans une cellule solaire à jonction p-n

simple, pour une largeur de bande de 1.1eV en silicium, et en considérant qu'un photon absorbé (d'énergie $h\nu > E_g$) ne peut donner lieu qu'à une seule paire électron-trou [17].

Les pertes de l'énergie du spectre lumineux (figure I.5), se présentent sur les zones (1) et (2) à cause des photons qui ont une énergie $< E_g$ du silicium, donc ils sont rejetés car ils ne sont pas absorbés (23.5%), et le second type ce sont les pertes par thermalisation, l'énergie du photon est $> E_g$, ce qui cause la conversion d'énergie cinétique par émission de phonon (33%) [17].

Suivant l'énergie de gap E_g du semi-conducteur, les photons ayant une énergie inférieure à E_g ne pourront pas être utilisés, et seront donc convertis en chaleur. Les photons ayant une énergie supérieure à E_g pourront eux déloger un électron utile, mais l'énergie excédentaire sera perdue elle aussi.

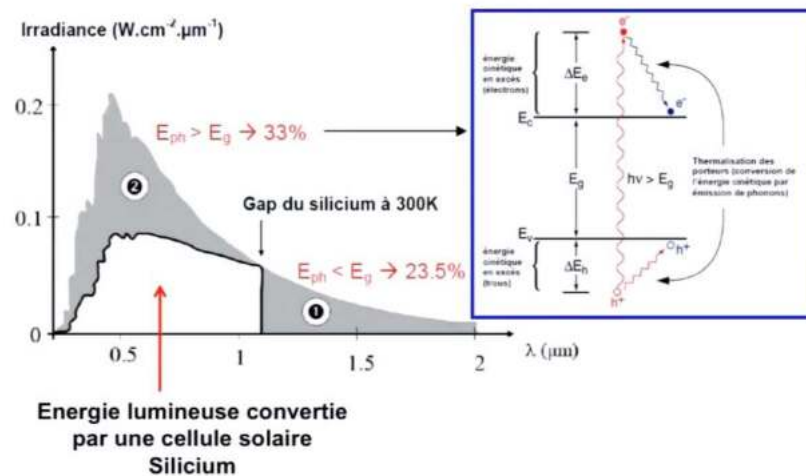


Figure I.5 : Principales pertes intrinsèques pour une cellule photovoltaïque en silicium. (1) Pertes des photons de grandes longueurs d'onde. (2) Pertes dues à l'énergie excédentaire des photons. A droite, on a illustré le phénomène de thermalisation [17].

Suite à ce type d'inconvénients dus aux limites technologiques, les chercheurs s'orientent vers d'autres solutions concrétisées par la proposition de cellules solaire exposées dans la seconde génération.

I.2.2. Cellule solaire de seconde génération

Les cellules solaires de deuxième génération sont généralement appelées cellules solaires à couches minces car, comparées aux cellules à base de silicium cristallin, elles sont fabriquées à partir de couches de matériaux semi-conducteurs d'une épaisseur de quelques micromètres (1-10 μm de matière active) seulement. La combinaison de l'utilisation de moins

de matériaux et de processus de fabrication à moindre coût permet aux fabricants de panneaux solaires de produire et de vendre des panneaux à un coût beaucoup plus faible.

Il existe essentiellement trois grandes familles de cellules solaires qui sont considérées dans cette catégorie :

- Le silicium amorphe (a-Si) et le microcristallin (a-Si/ μ c-Si) ou le multi-cristallin (mc-Si),
- La cellule au Tellure de cadmium (CdTe),
- Diséléniure de cuivre et d'indium (CIS) et le diséléniure de cuivre et d'indium gallium (CIGS).

Ces technologies sont considérées plus avantageuses, parce que CdTe, CIS et a-Si absorbent le spectre solaire plus efficacement que c-Si ou mc-Si qui ont seulement un rendement entre 10-15%. Ces couches minces peuvent également être déposées sur des substrats flexibles. Ensemble, ces technologies représentaient environ 16,8% des panneaux vendus en 2009 [18, 19].

I.2.2.1. Cellules solaire à couche mince : silicium amorphe

Les premières cellules solaires a-Si à couches minces étaient disponibles dans le commerce à partir de 1980, commercialisé par l'entreprise SANYO, avec des rendements typiquement autour de 5 à 8%. Le défi pour les matériaux à base de a-Si a été d'améliorer la stabilisation du rendement, qui est inférieure au rendement initial due à la dégradation provoquée par la lumière, l'effet Staebler-Wronski [23], propriété fondamentale du a-Si.

Il est important que l'absorption de la lumière solaire dans le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) soit très différente de l'absorption dans le silicium cristallin. La figure I.6 compare le spectre d'absorption du silicium monocristallin avec celui du matériau a-Si:H. Le gap effectif du silicium amorphe a-Si:H est supérieur à celui du Si cristallin, ce qui est évident à partir de la courbe en ligne continue qui s'élève rapidement dans une plage d'énergie d'environ 0,5 eV par rapport à la courbe en ligne pointillé de la figure I.6. Au-dessus de 1,9 eV, cependant, le coefficient d'absorption dans le silicium amorphe a-Si:H devient supérieur par rapport au silicium cristallin, ce qui signifie qu'une couche mince du silicium amorphe a-Si:H dans la plage d'épaisseur de $1\mu\text{m}$ est suffisante pour absorber considérablement la lumière du soleil. Cela donne à entendre qu'à partir d'un modèle de bande pour a-Si:H dans lequel les propriétés du gap indirect du silicium sont relaxés par l'absence d'ordre à longue distance, ce qui rend le comportement du silicium amorphe a-Si:H similaire à un semi-conducteur à gap direct [20].

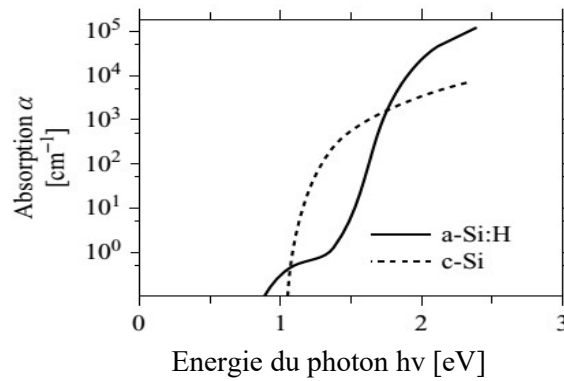


Figure I.6 : Comparaison des coefficients d'absorption du a-Si:H et c-Si [20].

Les caractéristiques intéressantes du diagramme de bande d'énergie pour le silicium amorphe sont présentées sur la figure I.7. En raison du désordre à longue portée, les valeurs du bord de la bande de conduction E_C et du bord de la bande de valence E_V ne sont pas clairement définies comme dans le silicium cristallin. La densité des fonctions d'états existe à la fois pour les électrons au-dessous de E_C et pour les trous au-dessus de E_V qui décroissent exponentiellement en densité dans l'intervalle d'énergie. Ils sont appelés les queues de bande (band tails). La bande interdite n'est donc pas définie avec précision, mais elle peut être approximée, comme dans la figure I.7, d'environ 1,75 eV. Il existe une distinction importante entre les états dans les queues de bande dans la bande interdite et les états en dehors de la bande interdite : les premiers sont localisés tandis que ceux-ci sont délocalisés dans le semi-conducteur cristallin idéal. Les queues de bande sont le résultat des troubles localisés, ce qui se traduit par des états localisés. La conduction dans a-Si:H est essentiellement due aux états délocalisés en dehors de la bande interdite.

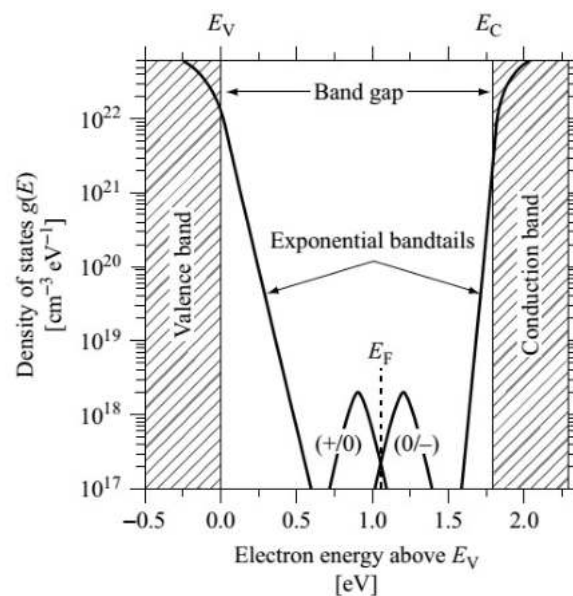


Figure I.7 : Densité des états d'électrons dans a-Si: H. ainsi que les queues de bande et les états intermédiaires en raison de défauts [21].

La meilleure structure qui va pour une cellule solaire en silicium amorphe est nommée la structure p – i - n. Il s'agit d'une diode p-n avec une épaisse couche intrinsèque prise en sandwich entre les minces couches p et n. Les épaisseurs typiques des couches p et n sont de l'ordre de 20nm et l'épaisseur de la couche intrinsèque est de l'ordre de ≈ 500 nm. La raison de l'insertion de la couche intrinsèque concerne le problème de la mobilisation adéquate des trous et des électrons dans le matériau a-Si:H dopé. L'objectif est de s'assurer que pratiquement toute l'absorption des photons se produit dans la couche intrinsèque. Ceci est tout à fait le contraire de ce qui se passe dans la cellule solaire cristalline, dans laquelle la plupart de l'absorption se produit dans le matériau de type p. Des mobilités d'ordre $1\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ sont typiques de la couche intrinsèque. Cette valeur de mobilité est faible par rapport à la mobilité du silicium cristallin d'ordre de grandeur de $1000\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$. Cependant, l'épaisseur typique des cellules solaire amorphes est de $0,5\text{ }\mu\text{m}$, beaucoup plus mince qu'une épaisseur de cellule cristalline classique de $200\text{ }\mu\text{m}$. Cela permet d'assurer des mobilités relativement faibles. La tension en circuit ouvert des cellules de silicium amorphe est plus élevée que dans les cellules cristallines d'environ $0,5\text{ V}$. Cela se traduit par l'augmentation du seuil d'absorption correspondant à $0,5\text{ eV}$. Les tensions en circuit ouvert mesurées sont proches de 1 V .

Il existe deux conceptions de cellule à base du a-Si:H dans lesquelles l'illumination est soit incidente à travers le substrat sur la surface inférieure de la cellule, soit directement incidente sur la surface supérieure de la cellule. Pour la conception du substrat transparent, on utilise un substrat en verre et on le recouvre d'abord d'une électrode transparente composée d'un matériau d'oxyde conducteur transparent (TCO) tel que In_2O_3 (ITO) dopé à l'étain ou ZnO dopé à l'aluminium suivi de la couche de type p, qui agit comme une fenêtre, la couche intrinsèque, la couche de type n et enfin une électrode arrière. Il est usuelle que cette électrode arrière soit réfléchissante car elle permet à la lumière qui n'a pas été absorbée de réfléchir vers l'arrière et a encore une fois la possibilité d'être absorbée. Cette conception est utilisée dans des panneaux solaires rigides à faible coût. Dans le mode d'illumination directe, le substrat peut être non transparent. Un matériau pratique est une mince feuille d'acier inoxydable, qui sert d'électrode arrière et donne une cellule solaire flexible. La séquence de dépôt comprend une couche de type n, la couche intrinsèque, puis la couche de type p suivie d'une électrode avant transparente. Ce type de caractéristiques de conception a l'habilité d'incurvation et à faible poids figure I.8.

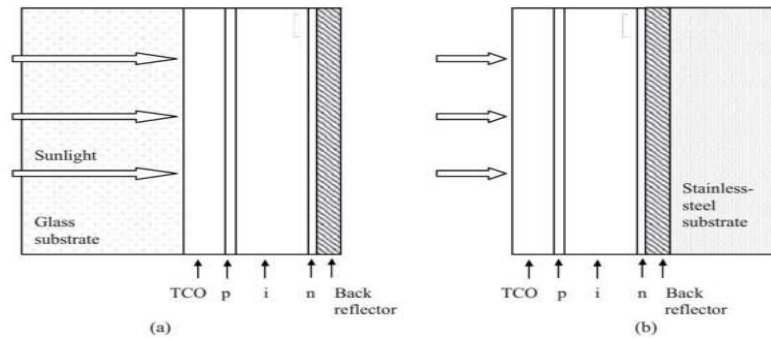


Figure I.8 : Structures des cellules solaires a-Si:H (a) Structure de substrat en verre avec éclairage à travers le substrat. (b) Structure de substrat en acier inoxydable avec illumination directe à travers la couche conductrice transparente [22].

Le rendement de conversion réalisable commercialement des cellules solaire a-Si:H à une jonction est d'environ 7% qui subit une réduction d'environ 5% après 1000 heures d'exposition au soleil, ce qui permet à la dégradation de Staebler-Wronski [23] de se stabiliser. Ceci est trois à quatre fois plus bas que les valeurs du rendement de cellule solaire en silicium cristallin. L'application de cellules solaire en silicium amorphe à jonction unique est donc limitée aux applications où une faible puissance et un faible coût sont nécessaires.

Beaucoup de travail a été fait pour augmenter le rendement de conversion des cellules solaire a-Si: H, et l'approche la plus efficace est de former une cellule à multi-jonction. Deux ou plusieurs jonctions p-i-n à couches minces sont empilées et connectées effectivement en série. La lumière qui n'est pas absorbée dans la première jonction passe à la deuxième jonction, et ainsi de suite. La tension totale devient la somme des tensions de circuit ouvert de chaque jonction p – i - n.

La clé du succès est de modifier l'énergie du gap de chaque jonction de telle sorte que la première jonction ait le plus grand gap, qui absorbe les photons à haute énergie mais transmet aussitôt les photons d'énergie faible à la seconde jonction, qui a un gap inférieur. Dans ce schéma, la tension de circuit ouvert de la première jonction est la plus élevée et prend le meilleur avantage des photons à énergie élevée, alors que dans une cellule solaire à jonction unique avec un faible gap, ces photons d'énergie élevée génèrent des paires électrons qui perdent leur excès d'énergie sous forme de chaleur avant d'être collectés. Ce concept est connu sous le nom de fractionnement du spectre (splitting spectrum).

Il existe d'autres avantages qui résultent de l'utilisation de cellules de multi-jonction. Le courant total pour une puissance de sortie électrique donnée diminue, en raison de la tension de sortie élevée. Cela diminue les pertes résistives. De même, l'épaisseur de chaque jonction est inférieure à celle d'une cellule à jonction unique. Cela réduit les pertes de recombinaison de porteur et augmente le rendement ainsi que le facteur de forme de la cellule.

Afin d'obtenir les ajustements de bande interdite requis, le Si doit être combiné avec d'autres éléments pendant la formation des couches amorphes. L'alliage le plus approuvé est $a\text{-Si}_{1-x}\text{Ge}_x$: H. En changeant la valeur de x , la bande interdite peut être ajustée de 1,1eV ($x = 1$) à 1,7eV ($x = 0$) [23]. Cela semble être une façon presque idéale de préparer une cellule tandem ; cependant, il y a des défis. Le germanium est beaucoup plus cher que le silicium et, plus important encore, la densité de défaut effective dans une jonction p-n augmente lorsque x augmente, ce qui diminue le facteur de forme. Les défauts piègent les porteurs (trous en particulier) dans la couche intrinsèque, ce qui les empêche d'être collectés. En pratique, le minimum de la bande interdite concevable est à 1,4 Ev [24].

Une façon intéressante de réduire ce problème consiste à faire varier la concentration du germanium en fonction de la profondeur à l'intérieur de la couche intrinsèque d'une jonction p-n donnée. Si la teneur en germanium est élevée vers le côté p de la jonction, alors les trous photo-générés dans la couche i auront une distance plus courte pour se déplacer vers le côté p, ce qui diminuera leur probabilité d'être piégés.

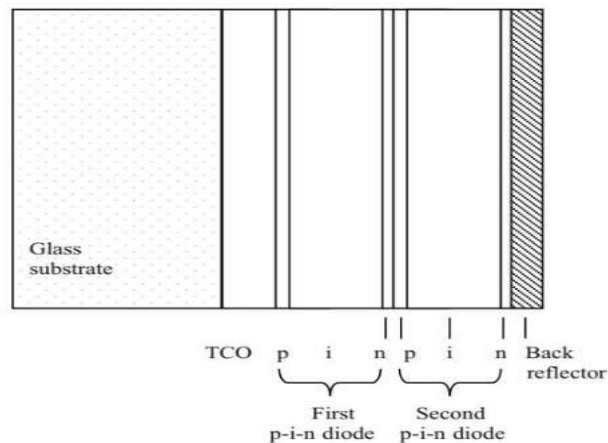


Figure I.9 : Structure de cellule solaire tandem sur substrat de verre [24].

Une condition essentielle pour le bon fonctionnement des cellules solaire à multi-jonctions est une conduction adéquate entre chaque jonction de l'empilement. La figure I.9 présente la structure d'une cellule tandem. La jonction n-p formée entre les deux jonctions p-i-n est inversement polarisée en fonctionnement normal ; cependant, elle permet le passage du flux de courant car elle fonctionne comme pour le cas de la diode tunnel. Le courant tunnel peut s'écouler, à condition que des niveaux de dopage dégénérés soient appliqués aux deux couches n et p et que ces couches soient donc fortement dopées. Heureusement, cela ne compromet pas le fonctionnement des dispositifs p-i-n puisque la couche critique absorbant la lumière est la couche intrinsèque.

Il existe également un développement dans des cellules solaires multi-jonction en silicium à couches minces dans lesquelles une couche arrière de silicium est cristallisée et est

appelée poly-cristalline ou microcristalline plutôt qu'amorphe. Ces cellules peuvent être développées sur des substrats de verre et la cristallisation est obtenue par un recuit thermique rapide. La couche de silicium poly-cristallin a un seuil d'absorption qui est inférieur en énergie, permettant ainsi une meilleure utilisation pour les longueurs d'onde étendues. Cependant, les défis sont les suivants :

En raison du plus faible coefficient d'absorption du silicium cristallin, le recyclage de la lumière est critique, et des électrodes hautement réfléchissantes et des systèmes de piégeage de la lumière sont essentiels.

I.2.2.2. Cellules solaire à couche mince : au tellurure de cadmium (CdTe)

Les cellules solaires à couches minces les plus connues pour la production d'énergie ne sont pas à base de silicium. Au lieu de cela, le CdTe semi-conducteur du groupe II-VI a été exploité, et les cellules à couche mince avec plus de 11% de rendement de conversion sont en production à grande échelle.

Le CdTe est un semi-conducteur à gap direct avec une bande interdite de 1,5 eV. Comme il s'agit d'un matériau à gap direct, il a un coefficient d'absorption optique élevé de l'ordre de $5 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ pour les photons dont l'énergie est supérieure à 1,5 eV [25].

Pour les cellules CdTe, une couche mince de CdTe de type p d'environ 2 μm d'épaisseur est développée sur un substrat tel que du verre. La couche est composée d'un grand nombre de grains monocristallins colonnaires. La taille d'un grain varie dans un intervalle de 0,2 à 1,0 μm en coupe transversale, et la hauteur du grain est la même que l'épaisseur de la couche. En plus de la couche CdTe de type p, il existe d'autres couches plus minces dans les cellules solaires CdTe comprenant une couche CdS de type n et une couche TCO. Le CdS a une bande interdite plus large que le CdTe et par conséquent agit simultanément tel qu'un matériau fenêtre qui offre une absorption minimale de la lumière et ainsi que le côté n de la jonction p-n. La structure CdTe/CdS est un exemple de cellule solaire hétérojonction (Figure I.10) [25].

Les cellules solaire homo-jonction à base de CdTe peuvent être formées, et le CdTe peut être développé soit de type n ou de type p. Une méthode pour obtenir le CdTe de type n est d'introduire du Cd en excès, alors que pour le CdTe de type p, on utilise un excès de Te. Des dopants tels que In et Au peuvent également être utilisés pour obtenir respectivement du dopage de type n et de type p. Cependant, les homo-jonctions n'ont pas démontré le plus haut rendement des cellules solaires.

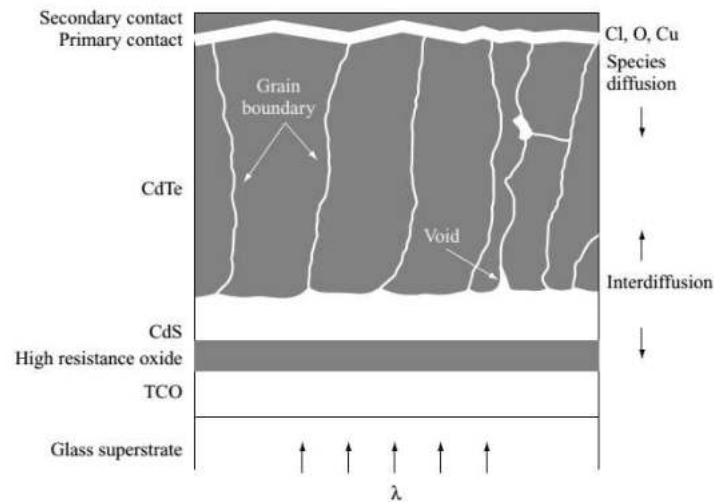


Figure I.10 : Structure de la cellule solaire CdTe/CdS montrant également les grains CdTe.

Les cellules solaires CdTe et CIGS peuvent atteindre un rendement plus de 10% sans passer par la structure en tandem, ce qui leur donne un avantage sur le coût du silicium. Cependant, il existe une controverse considérable sur la viabilité à long terme de ces systèmes de matériaux alternatifs. Le Cd utilisé dans les cellules CdTe est toxique et les cellules à base du matériau CIGS nécessitent également une couche de CdS [25].

Il est à noter qu'un nombre croissant de pays limitent l'utilisation du Cd. En outre, l'offre mondiale d'éléments tels que Te, In et Ga n'est actuellement pas suffisante pour permettre une croissance sans restriction du volume de fabrication de ces cellules solaires à couches minces. En plus, le tellure (Te) est un élément peu abondant avec une production qui se limite à environ 250 tonnes [25] par an et qui pourrait donc se tarir ou devenir très coûteux à extraire. Son processus de fabrication n'est donc pas sans risque et une majorité de fabricants se sont écartés de cette voie.

I.2.2.3. Cellules à base de Sélénure de cuivre et d'indium (CIS) et le Sélénure de cuivre et d'indium gallium (CIGS)

Les cellules CIGS sont constituées par empilement (figure I.11) de plusieurs couches. Tout d'abord, une couche métallique de molybdène de $0.5 \mu\text{m}$ d'épaisseur est déposée sur du verre de silicate sodocalcique de 1 à 3mm d'épaisseur, pour réaliser le contact arrière. L'hétérojonction est formée entre les semi-conducteurs CIGS de type P provenant de défauts intrinsèques, d'environ $1.5\mu\text{m}$ et ZnO (Oxyde de Zinc) de type N grâce à l'incorporation d'aluminium (Al), de $1\mu\text{m}$ d'épaisseur, avec une fine couche d'interface constituée de CdS (Sulfure de Cadmium) d'environ 50 nm et de ZnO. Ce dopage asymétrique est à l'origine de la région de charge d'espace qui s'étend davantage dans le CIGS que dans le ZnO. La couche

de CIGS sert d'absorbeur avec une énergie de bande interdite de 1,02 eV (CuInSe_2) ou de 1,65 eV (CuGaSe_2) [26].

L'absorption est minimisée dans les couches supérieures, appelées fenêtres, par le choix de bandes interdites d'énergie plus élevée : $\text{ZnO}=3,2$ eV et $\text{CdS}=2,4$ eV. Le ZnO dopé sert également de contact supérieur pour collecter le courant. Les dispositifs expérimentaux, typiquement d'une surface de $0,5 \text{ cm}^2$ présentent une grille de Ni/Al déposée sur la face avant pour réaliser le contact avec le ZnO.

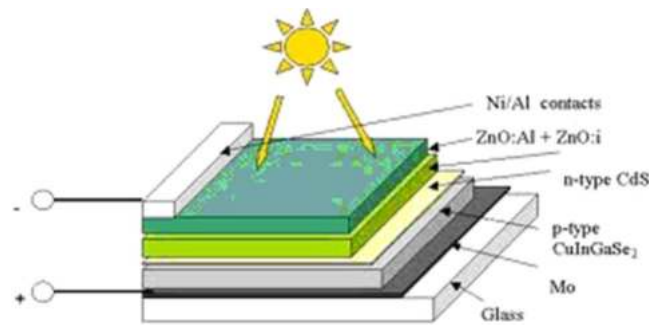


Figure I.11 : Structure d'une cellule solaire à base de CIGS [27].

Le matériau à la base du CIGS est le CIS (CuInSe_2). C'est un semi-conducteur I-III-VI₂ qui possède une structure cristalline *chalcopyrite*. Dans le cas du CIGS, les sites des atomes du groupe III sont donc occupés par des atomes d'In ou de Ga, dans des proportions dépendant de la composition de l'alliage.

Le CuInSe_2 et le CuGaSe_2 sont des matériaux semi-conducteurs possédant respectivement des gaps directs de 1.035 eV et 1.68 eV. Cette différence est majoritairement liée à une différence de minimum de la bande conduction (E_c). Puisque le CIGS est une solution solide de CuInSe_2 et de CuGaSe_2 , le ratio $x=[\text{Ga}]/([\text{In}]+[\text{Ga}])$ détermine le taux d'atomes de gallium qui remplacent les atomes d'indium dans la structure. La largeur de la bande interdite du CIGS varie en fonction de x entre les valeurs du pur CIS et du pur CGS, suivant la loi empirique suivante.

$$E_g = 1.035 + 0.65x - 0.264x(1 - x) \quad (1.1)$$

Le CIGS est donc un matériau dont E_g peut être ajusté entre 1.035eV et 1.68eV en fonction du taux de gallium [28]. La valeur optimale d' E_g dépend de plusieurs facteurs. Du point de vue de l'absorption des photons, il est préférable d'avoir une valeur de E_g réduite, permettant d'absorber un spectre plus large (plus grandes longueurs d'onde). Il en résulte un courant plus important délivré par la cellule solaire (J_{sc}). Cependant, c'est la valeur de E_g qui détermine la tension maximale délivrée par la cellule. Afin de maximiser le rendement de conversion, il est donc nécessaire d'obtenir un compromis idéal entre courant et tension. La

plupart des résultats expérimentaux publiés dans le domaine des cellules CIGS montrent que les meilleurs rendements sont obtenus avec un gap d'environ 1.2eV, ce qui correspond à un taux de Ga proche de 30% [29].

Le matériau CIGS utilisé dans les cellules solaire est poly-cristallin et possède donc des joints de grains. A ces interfaces, le CIGS présente divers défauts structuraux chargés positivement, principalement des lacunes de sélénium VSe. Ces défauts chargés entraînent localement une courbure des bandes (zone de déplétion) et peuvent devenir une source de recombinaisons.

Notons que le matériau CIGS possède un gap direct. De ce fait, l'absorption des photons ayant une énergie proche du gap ne nécessite pas l'intervention de phonons et il en résulte un coefficient d'absorption optique α élevé (comparé à un semi-conducteur à gap indirect comme le silicium). Pour une énergie de photon $h\nu$ donnée, le coefficient d'absorption vaut approximativement :

$$\alpha(h\nu) = \frac{A}{h\nu} \sqrt{h\nu - E_g} \quad (I.2)$$

Cette relation illustre clairement l'influence du gap sur la plage d'énergies dans laquelle le CIGS absorbe. La figure I.12 compare le coefficient d'absorption optique du CIS (ce qui correspond au plus petit gap possible pour le CIGS, et donc la plage d'absorption maximale) à celui du Si en fonction de l'énergie des photons incidents. On remarque qu'il existe un écart d'un ordre de grandeur entre le Si et le CIS, ce qui montre l'intérêt de ce dernier pour une utilisation en couches minces. Ainsi, une couche de CIGS d'une épaisseur de 1 μm suffit à absorber 95% du spectre solaire pour les photons dont l'énergie est supérieure à E_g [30].

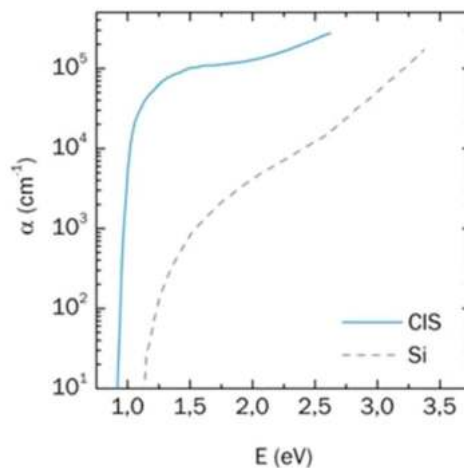


Figure I.12 : Coefficient d'absorption optique α en fonction de l'énergie E des photons incidents dans le CIS et le Si [30].

La capacité d'une cellule à générer et collecter des porteurs à partir d'un rayonnement incident est caractérisée par le rendement quantique externe (*External Quantum Efficiency*,

EQE). Ce dernier représente le nombre de porteurs effectivement collectés pour un photon incident et pour une longueur d'onde donnée. La figure I.13 montre la courbe d'EQE d'une cellule CIGS ayant un gap de 1.12 eV. Les courbes correspondant aux différents mécanismes de pertes optiques et électroniques sont aussi représentées.

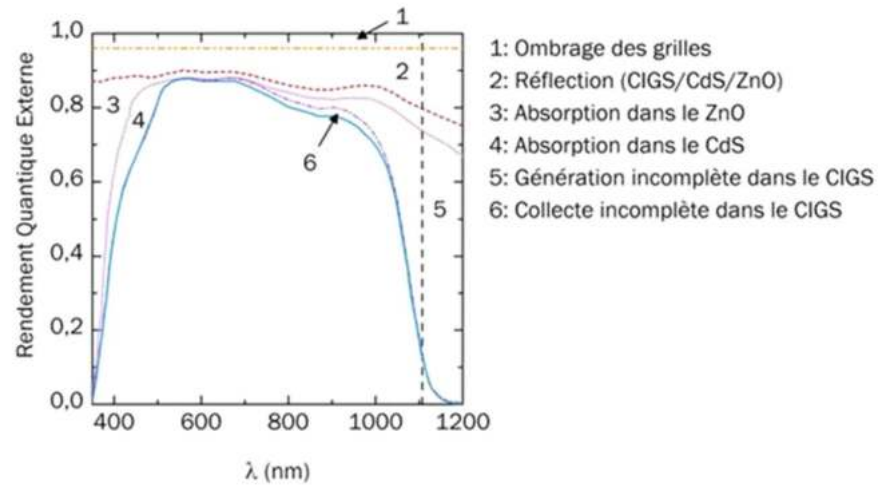


Figure I.13 : Rendement quantique externe de la cellule standard CIGS ayant un gap de 1.12eV. Les zones numérotées représentent les différentes pertes optiques et électroniques dans le dispositif. La ligne verticale pointillée correspond au gap du CIGS [31].

La technologie CIGS exhibe actuellement le meilleur rendement de production pour une cellule et pour des modules par rapport à toutes les technologies couches minces inorganiques. En 2008, un module CIGS mis au point par le NREL (National Renewable Energy Laboratory) battait le record du meilleur rendement de 19,9 %. Toutefois, durant cette même année, la technologie ne représentait que 1 % du marché mondial.

Cependant, il reste un grand nombre de points à améliorer afin de réduire le prix de ces cellules. Le principal challenge de la technologie CIGS couche mince est la réduction du prix des matériaux. Diverses pistes existent pour essayer de remplacer les matériaux chers comme l'InGa par de l'Al. De plus, il est nécessaire également de trouver des solutions pour moins gaspiller la matière première active pendant la fabrication. Une dernière piste consiste à réduire tout simplement l'épaisseur de la couche active.

Bien que la majeure partie de la production de cellules solaire soit faite sur des substrats de verre, on voit apparaître progressivement de nouveaux substrats souples compatibles avec la filière couche mince. Ces nouveaux substrats (métal ou plastique) présentent les avantages d'être plus légers que le verre, plus faciles à mettre en œuvre et surtout moins coûteux. Ces caractéristiques font d'eux des supports de choix pour le futur. Malgré ce rebondissement, il y a eu les cellules solaires de troisième génération.

I.2.3. Cellules solaire de troisième génération

I.2.3.1 Cellules solaire organiques (OPV)

Les cellules solaires organiques (OPV) suscitent depuis quelques années un intérêt croissant en tant qu'alternative possible au silicium. Elles sont particulièrement intéressantes en raison de leurs légèreté et flexibilité combinés à une mise en œuvre simple et économique par voie humide à faible impact environnemental. Les cellules photovoltaïques organiques s'appuient sur un mélange de polymères photosensibles et des petites molécules tel que le fullerène qui absorbe la lumière. Le mécanisme de génération des porteurs de charge dans la cellule solaire organique se repose sur cinq étapes (figure I.14).

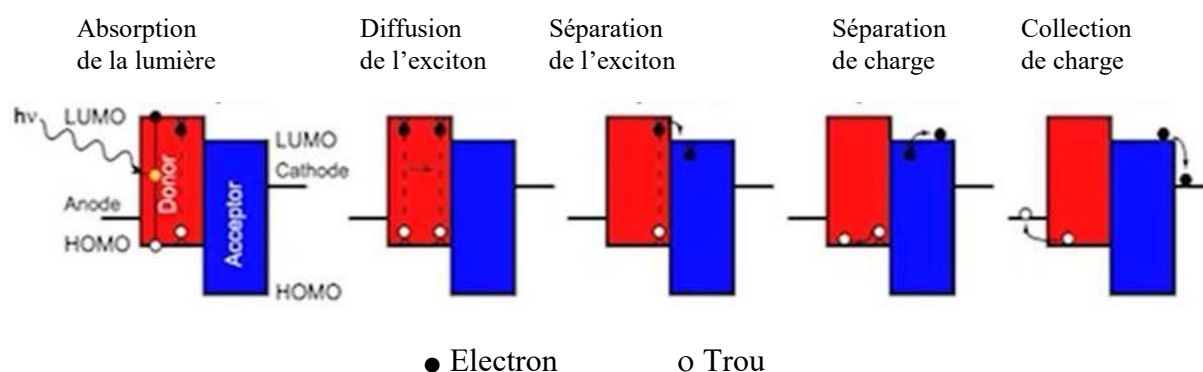


Figure I.14 : Les cinq étapes du mécanisme de générations et de collection des charges libres dans une cellule solaire organique [32].

Après l'absorption d'un photon par la matière organique, cela donne naissance à un exciton. Cet exciton est localisé pour une seule molécule, qui est généralement de l'ordre de grandeur du nanomètre. Un exciton a besoin d'énergie pour être séparé en une paire d'électron libre et d'un trou puisque la durée de vie des excitons est réduite. Pour produire une telle séparation, il faut un mélange de deux matériaux ayant une différence de potentiel chimique appropriée, qui fournit le champ électrique nécessaire pour rompre la liaison électron-trou. En particulier, le matériau qui donne un électron lors de la séparation de l'exciton est appelé donneur connu par l'acronyme LUMO (lowest unoccupied molecular orbital : le plus bas orbite moléculaire inoccupé et équivalent à la bande de conduction), tandis que le matériau qui reçoit un électron lors de la séparation de l'électron de l'exciton est appelé un accepteur, et se caractérise par l'acronyme HOMO (highest occupied molecular orbital: le plus haut orbital moléculaire occupé et équivalent à la bande de valence) (figure 1.15).

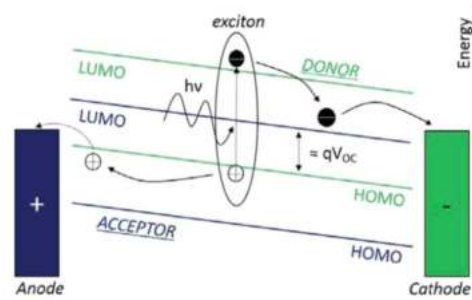


Figure I.15 : Un photon d'énergie $h\nu$ génère un exciton qui se sépare en un polaron positif et négatif. Les charges sont ensuite collectées au niveau des électrodes [33].

Le rapport de la puissance de sortie à la puissance d'entrée est le rendement de la photo-conversion η , également appelée « Power Conversion Efficiency » (PCE), voir éq. 1.3. Ce rendement dépend de l'architecture de la couche active, ce qui affecte profondément la probabilité de séparer un exciton.

$$\eta = \frac{P_M}{P_{IN}} = \frac{V_M \cdot I_M}{P_{IN}} = FF \frac{I_{SC} \cdot V_{OC}}{P_{IN}} \quad \text{I.3}$$

où :

PM : la puissance maximale à la sortie avec V_M (V) et I_M (A) sont respectivement la tension et le courant au point de puissance maximum (MPP), I_{SC} (A) est le courant de court-circuit, V_{OC} (V) est la tension de circuit ouvert

FF : le facteur de forme, défini comme le rapport entre la puissance P_M et le produit entre la tension de circuit ouvert et le courant de court-circuit, voir éq. 1,4:

$$FF = \frac{P}{V_{OC} \cdot I_{SC}} \quad \text{I.4}$$

Le rendement dépend de plusieurs propriétés du matériau, par exemple le V_{oc} . En fait, la tension de circuit ouvert dépend de la valeur de LUMO de l'accepteur et de la valeur de HOMO du donneur, comme indiqué sur la figure I.16 et rapporté dans l'éq. 1,5:

$$qV_{OC} \approx E_{LUMO}(acceptor) - E_{HOMO}(donor) \quad \text{I.5}$$

$$q = 1.6 \cdot 10^{-19} C$$

Où :

q : la charge élémentaire,

E_{LUMO} (accepteur) : niveau d'énergie de l'accepteur LUMO,

E_{HOMO} (donneur) : niveau d'énergie du donneur HOMO.

Étant donné que les V_{oc} sont directement proportionnels au P_{CE} du dispositif (voir l'équation 1.4), beaucoup de groupes de recherche ont essayé de synthétiser des donneurs avec un faible HOMO, afin d'augmenter la valeur du V_{oc} . Cependant, la diminution du HOMO

provoque aussi une E_{GAP} plus étendue du donneur, puisque la position du LUMO ne peut pas être déplacée encore plus pour garantir une bonne séparation de l'exciton [33]. Une E_{GAP} plus grande implique moins d'absorption du spectre solaire (puisque moins de photons peuvent satisfaire la condition $E_{PH} > E_{GAP}$) et par conséquent, des porteurs moins collectés et un rendement plus faible. Donc, afin d'optimiser le rendement de la cellule, un compromis doit exister entre V_{oc} et I_{SC} .

En résumé, en 1986, la première démonstration d'une cellule solaire organique fonctionnelle a été présentée par Tang, avec une architecture élémentaire est un dispositif bicouche [34]. Cependant, cette structure a souffert d'un faible rendement due à la courte longueur de diffusion de l'exciton dans les cellules solaire organiques. Environ dix ans plus tard, G. Yu et al. ont introduit la cellule solaire hétérojonction volumique (BHJ : bulk heterojunction). Dans un tel dispositif, le mélange interpénétrant du donneur et de l'accepteur fournissait de grandes zones interfaciales qui augmentaient la vitesse de dissociation des excitons en réduisant la distance nécessaire aux porteurs avant la dissociation [35]. Plus tard, on a réalisé que le domaine des tailles du donneur et de l'accepteur peut être encore optimisé avec des additifs, tels que le 1,8-octanedithiol (ODT) et le di-iodo-octane (DIO) [36]. Un autre avantage du BHJ est qu'elle peut être préparée immédiatement en revêtant une solution bien mélangée, sans avoir besoin de masque.

1.2.3.2. Cellules à pigments photosensible DSSC (Dye sensitized solar cells)

Les cellules à pigments photosensible (DSSC), ou encore cellules à colorant (DSC), sont des cellules qui convertissent toute la lumière visible en énergie électrique. Le principe de fonctionnement de la DSSC est inspiré du phénomène naturel de la photosynthèse. Les premières DSSC sont apparues au début des années 1970. Il s'agit des cellules de chimisorber ou physisorber un colorant organique sur un semi-conducteur inorganique transparent. Contrairement aux cellules à hétérojonction volumique, l'absorption de la lumière et la conduction des charges sont assurées par plusieurs entités différentes dont le nombre et la nature vont dépendre de la technologie utilisée (liquide ou solide). Jusqu'en 1991, ces cellules étaient essentiellement constituées d'une hétérojonction plane entre le semi-conducteur et le colorant. De ce fait, la faible surface spécifique limitait grandement les performances des dispositifs. Le rendement de conversion record avoisinait alors 1.5%. En 1991 O'Regan et Grätzel à l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (Suisse) ont l'idée d'absorber le colorant sur de l'oxyde de titane mésoporeux (TiO_2). Cette structure qui a porté le nom de Grätzel (G.cell), en trois dimensions augmente la surface spécifique d'environ un facteur de 1000 par rapport à une surface plane. Un rendement record de 7.9% [37] a été annoncé.

Depuis, des rendements de conversion record autour de 12.5% ont été obtenus par plusieurs groupes [38].

Selon le schéma de la figure I.16, le principe de fonctionnement de la cellule DSSC se dévoile comme suit : La lumière du soleil pénètre dans la cellule à travers le contact transparent composé d'oxyde d'étain dopé au fluor (déposé sur une plaque de verre conductrice SnO₂: F, FTO), en frappant le colorant qui est déposé sur la surface du semi-conducteur TiO₂ mésoporeux. Les photons créeront un état excité du colorant, d'où un électron peut être "injecté" directement dans la bande de conduction du TiO₂, et de là il se déplace par diffusion à l'anode située au-dessus. Pendant ce temps, la molécule de colorant a perdu un électron et la molécule se décompose si un autre électron n'est pas fourni. Le colorant en retire l'un de l'iode dans l'électrolyte en dessous de l'oxyde de titane (TiO₂). Cette réaction se produit assez rapidement (de l'ordre de picoseconde) par rapport au temps qu'il faut pour que l'électron injecté se recombine avec la molécule de colorant oxydé, empêchant cette réaction de recombinaison qui court-circuiterait effectivement la cellule solaire. Le TiO₂ récupère ensuite son électron manquant en se diffusant mécaniquement au fond de la cellule, où la contre-électrode réintroduit les électrons après avoir traversé le circuit externe.

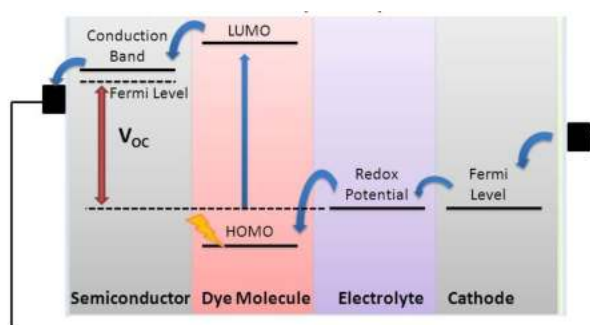


Figure I.16 : Schéma illustrant le principe de fonctionnement d'une cellule DSSC [39].

Un défaut des conceptions précoces est que l'électrolyte liquide, typiquement une solution organique du couple redox d'iode / triiode (I⁻ / I₃⁻), est corrosif, volatil et de plus enclins à fuir. Et il peut réagir avec le colorant, qui limite la stabilité à long terme.

En cherchant à améliorer la conception, les chercheurs de l'Université Northwestern ont remplacé l'électrolyte liquide par un nouveau solide semi-conducteur inorganique : l'iode de césium-étain dopé au fluor (CsSnI_{2.95}F_{0.05}). L'équipe a rapporté en 2012 que le solide a surmonté les problèmes de corrosion et de réactivité et a conduit à des cellules avec un rendement d'environ 10%.

I.2.3.3. Cellule solaire Pérovskite

Les cellules solaires Pérovskites (PSC) représentent un nouveau concept et une nouvelle conception en ce qui concerne le photovoltaïque classique de troisième génération. Ces dispositifs sont un héritage de cellules solaires à pigments photosensibles (DSSC) qui ont démontré une efficacité élevée par Michael Grätzel et Brian O'Regan en 1990 [40]. Les DSSC mettent en œuvre un semi-conducteur organique (un colorant) en sensibilisant une anode d'oxyde métallique qui peut être régénérée avec un électrolyte d'iodure en version liquide ou une couche d'extraction de trou à l'état solide qui est typiquement une petite molécule organique. En gros, ces cellules jouent le rôle de système photo-électrochimique.

Afin d'augmenter l'interaction entre la photo-anode et le colorant, ces dispositifs ont mis en œuvre une configuration mésostructurée de la photo-anode. Le premier prototype de PSC a été réalisé avec la structure d'un DSSC liquide en 2009 avec l'absorbeur de pérovskite remplaçant le colorant conventionnel [41].

La pérovskite est un minéral décrit en 1839 par le minéralogiste allemand Gustav Rose à partir d'échantillons provenant de l'Oural. Il l'a dédiée au minéralogiste russe Lev Alexeïevitch Perovski (1792-1856). À l'origine, le terme désignait l'oxyde de calcium et de titane de formule CaTiO_3 . Mais ce nom est aussi maintenant associé à une structure cristalline absorbante : ABX_3 . Ce matériau est conceptuellement un composé hybride d'halogénure d'organo et de -plomb obtenu à partir d'une synthèse relativement simple et déposé par des techniques conventionnelles traitées en solution [42]. La figure I.17 présente la structure de la pérovskite avec le spectre XRD relatif.

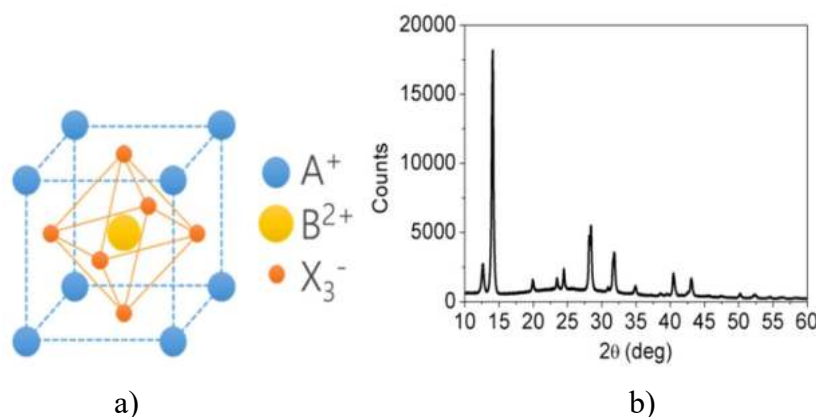


Figure I.17 : a) Structure de la pérovskite ABX_3 . Applications en photovoltaïque $\text{A}^+ = \text{CH}_3\text{NH}_3^+$, $\text{B}^{2+} = \text{Pb}^{2+}$, $\text{X}^- = \text{I}$. b) XRD spectre d'une couche mince de pérovskite [42].

La partie organique du matériau est un dérivé d'aminé, la partie inorganique est un composé halogéné de plomb. Pour les applications photovoltaïques, la combinaison la plus utilisée des deux est l'iodure de méthylammonium ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{I}$ abrégé avec MAI) comme précurseur organique et l'iodure de plomb (PbI_2) comme sel de plomb. La matière résultante est la pérovskite d'iodure de plomb de méthylammonium ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$) également appelée

MAPbI₃ qui est déposée par un processus d'évaporation thermique en deux étapes : En abaissant la température du substrat pendant le dépôt, cela peut inhiber initialement le mélange des deux couches. Vient par la suite les mesures de transmission de lumière visible et infrarouge, de diffraction des rayons X et de photoluminescence pour révéler les transformations à température ambiante dans le vide et dans l'air ambiant, lorsque le MAI diffuse dans le réseau PbI₂ pour former MAPbI₃ [43].

Le point de départ pour la compréhension de la photo-physique de la PSC est de comprendre les propriétés optiques de la pérovskite. Le spectre d'absorption de MAPbI₃ est présenté sur la figure I.18. Avec la limite de la bande à 780 nm, cette pérovskite est capable d'absorber tout le spectre visible. Cette forte absorption optique est l'une des principales caractéristiques d'un matériau photovoltaïque. Il réduit l'épaisseur requise de la couche, évitant ainsi le transport et la recombinaison. A partir des spectres d'absorption et du calcul théorique, il a été déterminé que la pérovskite est un semi-conducteur à bande interdite directe [44]. La limite du spectre définit un écart de bande de 1,6 eV, qui est l'une des valeurs les plus appropriées pour des applications photovoltaïques. Si l'iodure est remplacé par le bromure, la limite de la bande bleue passe à 560 nm et à 350 nm si le chlorure est utilisé à la place [45]. Ce décalage de l'absorption est corrélé à l'ouverture de l'intervalle de bande. Lors de l'illumination, des photo-charges sont générés à l'intérieur de la pérovskite. Si ces photo-charges ne sont pas collectées ou extraits, ils se recombinent de façon radicale dans des conditions idéales, émettant un photon. La photoluminescence (PL) de la pérovskite est provoquée par la recombinaison radiative des porteurs photo-induits [46].

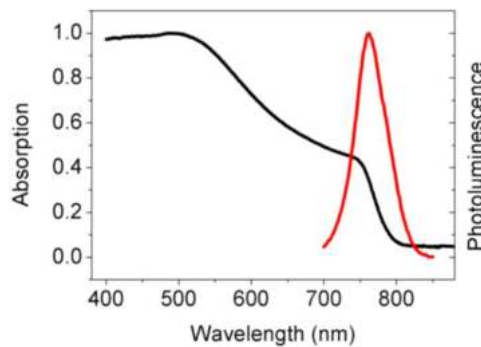


Figure I.18 : Spectre de photoluminescence et d'absorption des couches minces en MAPbI₃.

Donc, lors de l'illumination, l'absorbeur de pérovskite est capable de générer des charges directement ou par dissociation d'exciton, en fonction de la dimension des cristallites. Cependant, une fois que les photo-charges sont générés, la pérovskite est capable de les transporter (à la fois l'électron et le trou) suivant la direction du champ interne. Le transport des charges est une autre qualité importante des pérovskites.

Les charges sont capables de se déplacer sur toute l'épaisseur de la couche d'absorption principalement en raison des vitesses de recombinaison non radiatives extrêmement faibles (comparées à d'autres couches poly cristallins). Cette propriété se reflète sur une tension élevée en circuit-ouvert qui coïncide presque avec le potentiel de la bande interdite [47]

De nos jours, la PSC classique est réalisée dans la configuration de cellules solaire à couches minces. L'absorbeur de pérovskite est pris en sandwich entre deux couches d'extraction qui contribuent au champ interne pour l'extraction des charges. Néanmoins, les premiers dispositifs ont utilisé la configuration DSSC dans laquelle la pérovskite remplaçait le colorant organique [48]. La figure I.19 montre les différentes architectures utilisées.

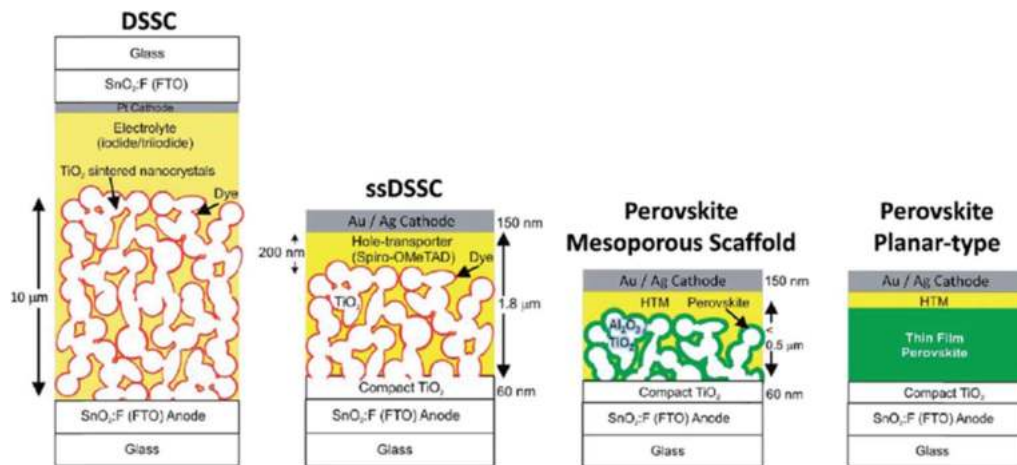


Figure I.19 : Différentes architectures des cellules solaires Pérovskites [49].

I.3. Conclusion

Il ressort de ce qui précède que ce n'est pas vraiment une question de rendement mais plutôt de procédés et de coût. L'investissement dans la filière des couches minces, représente une très grande part de marché qui ne cesse d'augmenter. Le silicium en couches minces est vraiment très encourageant. Les modules, sur les panneaux solaires, atteignent déjà entre 12 et 15 % de rendement. Les cellules photovoltaïques deviennent ainsi 100 fois plus fines, et donc potentiellement moins chères.

L'objectif de la recherche sur le solaire est de faire mieux et moins cher. A partir d'un procédé de fabrication à un prix raisonnable, une production de masse (rapidité de superposition de couches fines) avec des matériaux recyclable et un fonctionnement sous faible éclaircissement. A travers les notions présentées dans ce chapitre, cela nous a permis de construire une vision globale sur l'énergie photovoltaïque, via ses atouts et ses lacunes, qui ont poussés ce secteur à évoluer vers d'autres générations, grâce aux technologies de productions qui leur ont donné l'élan à dépasser leur inconvénient.

Chapitre II

Cellules solaires à hétérojonctions de SiGe en multi-tranches

II.1. Introduction	29
II.2. Cellule solaire mono-jonction en couches minces à base de SiGe	30
II.3. Cellule solaire double jonction en couches minces à base de a:SiGe	31
II.4. Cellule solaire triple jonction en couches minces à base de a:SiGe	32
II.5. Etude numérique	33
II.6. Résultats et interprétation	34
II.7. Conclusion	44

II.1. Introduction

Récemment, la technologie des cellules solaires est l'une des applications des énergies renouvelables les plus fiables à haut rendement. L'augmentation du marché photovoltaïque nécessite le développement de nouveaux matériaux et modèles basés sur l'optimisation du rapport coût / rendement pour une production en masse à plus grande échelle.

Le matériau de faible qualité et les substrats semi-conducteurs poly-cristallins à couches minces ont été largement utilisés. En outre, de nombreuses recherches expérimentales et de modélisation ont été réalisées pour élaborer de nouveaux matériaux composites [50-52].

Dans ce contexte, le SiGe en couches minces est considéré comme un candidat prometteur pour répondre aux besoins exceptionnels d'applications photovoltaïques avec des caractéristiques d'absorption améliorées et ce grâce à ses excellentes propriétés optiques, un rendement de conversion améliorée [50 - 57], sa compatibilité avec le procédé développé pour les cellules à base de silicium amorphes et un processus de fabrication facile par rapport aux matériaux polycristallins et monocristallins à base de Si.

Cependant, une baisse de la tension en circuit ouvert ne peut pas non plus être évitée en raison de l'augmentation de la concentration des porteurs de charge intrinsèque due à la plus petite bande interdite du SiGe que celle du Si [50 - 57].

Les pertes en tension en circuit ouvert et les déficiences de la performance cristalline jouent un rôle crucial dans la baisse d'utilisation des cellules solaires en SiGe [56]. Par conséquent, afin d'obtenir une vision globale de la performance de la cellule solaire en SiGe en couche mince, de nouveaux modèles, des conceptions et des approches d'optimisation sont indispensables pour la compréhension des caractéristiques fondamentales.

Dans ce contexte, plusieurs études ont été proposées afin d'analyser les cellules solaires en couches minces à base de SiGe et pour mieux comprendre leur comportement photovoltaïque et surmonter certains problèmes [58-62]. L'amélioration de l'absorption du SiGe mène à l'augmentation du gain en courant, mais la réduction de la bande interdite de l'alliage provoque des pertes en tension, ce qui tend à neutraliser l'amélioration du photo-courant de la cellule solaire en couches minces à base de SiGe [57].

Une nouvelle vision sur les structures des cellules solaires en couches minces à base de SiGe est proposée à partir de la structure conventionnelle, par l'ajout d'une couche intrinsèque muni de multi-tranches, sur les cellules solaires mono-jonction et tandem.

Toutes les simulations seront effectuées sous une illumination spectrale de AM1.5 et à température ambiante (300 K).

II.2. Cellule solaire mono-jonction en couches minces à base de SiGe

Une nouvelle conception de cellule solaire mono-jonction en couches minces à base de SiGe amorphe, incluant la région intrinsèque avec les multi-tranches est proposée, dans le but d'améliorer les performances électriques des cellules solaires en couches minces conventionnelles mono-jonction. Dans cette approche, la région multi-tranches est créée dans la couche intrinsèque de SiGe et est remplie de Si amorphe type p.

Un modèle numérique de la caractéristique I-V est élaboré pour mettre en avant l'impact de la nouvelle conception sur les performances électriques. Les résultats numériques seront utilisés pour optimiser les performances électriques de la conception proposée. L'idée clé de cette optimisation est de trouver les meilleures dimensions et paramètres électriques de la cellule solaire étudiée qui produira le rapport coût / rendement minimal pour des applications photovoltaïques fiables.

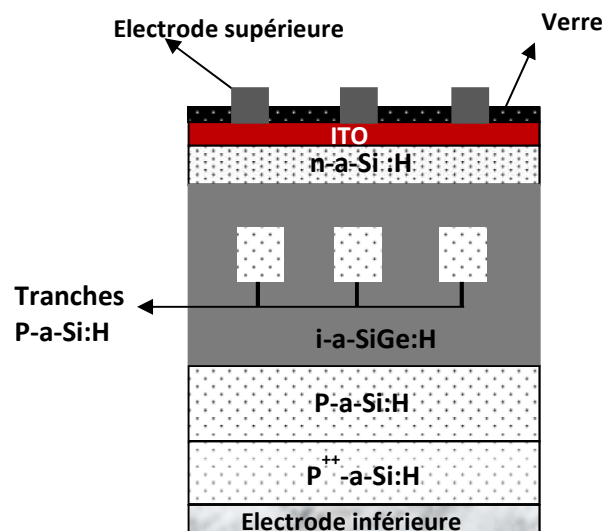


Figure II.1 : Coupe transversale de la cellule solaire étudiée en a-SiGe:H à couche mince

Sur la figure II.1, la coupe transversale de la cellule solaire en couches minces à base de a-SiGe: H comporte une région intrinsèque à multi-tranches.

Dans cette conception, la couche type-p P⁺⁺ a-Si: H est fortement dopée, comme sa conductivité est très élevée, cela permet à plus de lumière de passer à travers la couche intrinsèque.

II.3. Cellule solaire double jonction en couches minces à base de a:SiGe

Plusieurs études ont été proposées pour analyser les cellules solaires mono-jonction en couches minces à base de SiGe et ce pour mieux comprendre leur comportement photovoltaïque et surmonter certains problèmes [55, 59, 64, 65]. En raison de la limitation imposée par la conception de la jonction unique, où cette dernière ne peut pas absorber les photons à faible énergie, ce qui influe directement sur le rendement fourni par la cellule solaire, ce qui nous pousse vers la conception des cellules solaires tandem à double jonction, qui sont basées sur le principe de décomposition spectrale. Dans cette partie, on propose une nouvelle conception de cellule solaire en couches minces à double jonction à base de SiGe amorphes en insérant une région multi-tranches afin d'améliorer les performances électriques des cellules solaires en couches minces à base de SiGe amorphes. Dans notre approche, la région multi-tranches est créée dans la couche de Si intrinsèque supérieure et remplie de Si amorphe dopée type p.

Dans notre modèle de cellule solaire à double jonction, nous avons choisi une couche de silicium amorphe hydrogéné comme couche intrinsèque frontale pour absorber des photons à haute énergie et une couche de SiGe amorphe comme couche intrinsèque arrière pour absorber des photons à faible énergie, les autres couches sont des couches de silicium amorphe de type p et de type n. Les deux jonctions ont été séparées à l'aide d'une couche d'ITO, afin de réduire la résistance shunt [68] de la cellule solaire double-jonction. Les tranches ont été introduites dans la couche intrinsèque frontale de la structure pour moduler et optimiser la résistance totale de la cellule solaire.

Dans l'étude numérique, la conception et l'optimisation d'une nouvelle cellule solaire multicouches prene plus d'avantage sur la conception utilisant les multi-tranches dans la couche supérieure du Si intrinsèque, afin de moduler et d'optimiser la résistance totale de la cellule solaire [66-67], et le SiGe utilisé comme couche intrinsèque inférieure permettant ainsi une absorption maximale du spectre solaires et générant ainsi un photo-courant maximal.

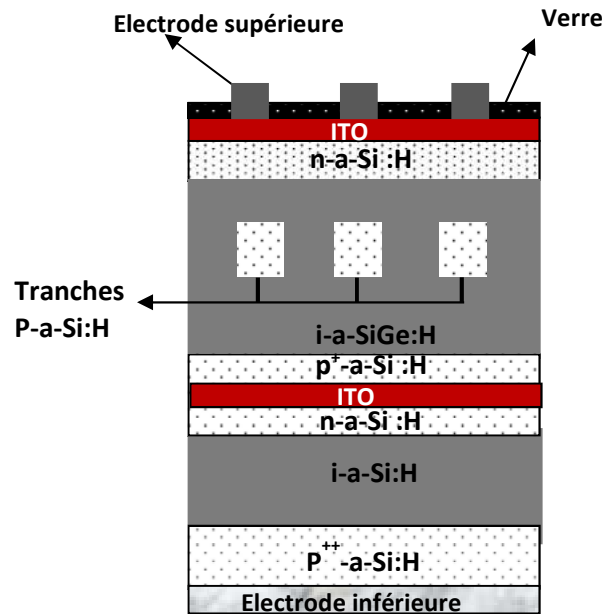


Figure II.2 : Coupe transversale de la cellule solaire double-jonction en couches minces à base de SiGe étudiée.

La vue schématique de la coupe transversale de la cellule solaire double jonction en couches minces à base de SiGe amorphe incluant la région multi-tranches est proposée sur la figure II.2.

II.4. Cellule solaire triple jonction en couches minces à base de a:SiGe

On propose une nouvelle conception de cellules solaires triple jonction en couches minces à base de SiGe amorphes incluant la région multi-tranches, dans la couche intrinsèque de la sous-cellule supérieure. L'objectif derrière cette approche est d'améliorer les performances électriques des cellules solaires amorphes en couches minces. Dans la conception proposée, la région multi-tranches est créée et implantée dans la couche intrinsèque supérieure et remplie de Si amorphe type p.

La structure proposée est analysée à l'aide du simulateur bidimensionnel ATLAS [69]. En optimisant la région multi-tranches, le champ électrique sera modulé et que le rendement électrique maximal peut être obtenu. Les résistances shunt et série appropriée peuvent être mentionnées comme les principaux paramètres de cette cellule solaire, ce qui peut affecter le comportement électrique. Les résultats démontrent l'augmentation du rendement électrique et du facteur de forme comme prévu par rapport à une cellule solaire conventionnelle triple jonctions en couches minces à base de SiGe sans région multi-tranches [70, 71].

Dans notre modèle de cellule solaire, nous avons choisi une couche de silicium amorphe comme couche intrinsèque frontale pour absorber des photons à haute énergie et une couche de SiGe amorphe comme couches arrière (cellules secondaires moyennes et inférieures) pour absorber des photons à faible énergie. Les jonctions triples ont été séparées à l'aide d'une couche ITO, afin de réduire la résistance shunt de la cellule solaire étudiée.

La section transversale de la conception de la cellule solaire triple-jonction en couches minces à base de SiGe proposée est représentée sur la figure II.3. Dont on remarque, l'emplacement de la région multi-tranches dans la couche intrinsèque de la sous-cellule supérieure.

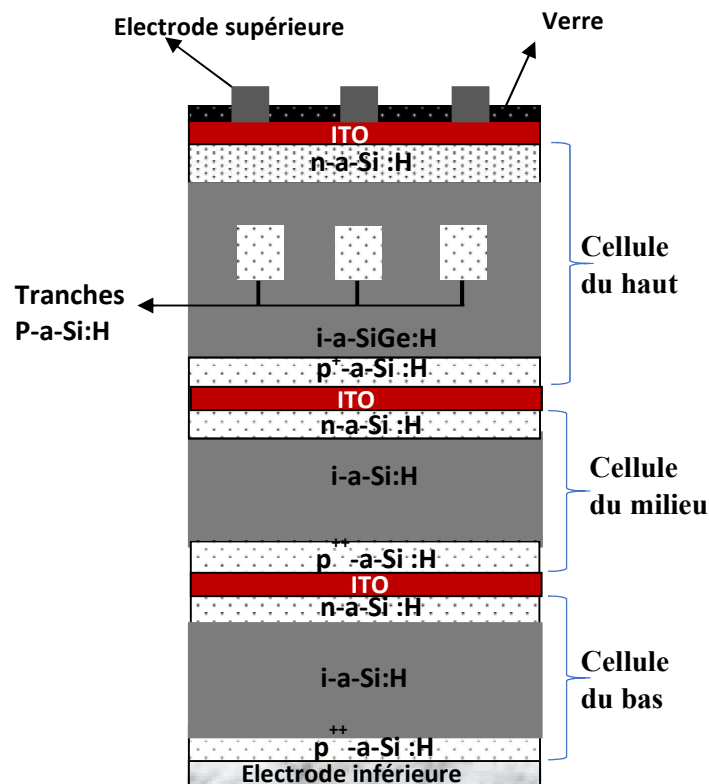


Figure II.3 : Coupe transversale de la cellule solaire triple jonction en couches minces amorphe à base de SiGe proposée.

II.5. Etude numérique

Dans cette partie de l'étude numérique, la densité totale d'états (DOS : density of states) est donnée comme une combinaison de quatre composantes : deux queues de bandes et deux niveaux profond de bandes, qui sont modélisées par des distributions exponentielles et gaussiennes, respectivement [58-59].

Pour les répartitions exponentielles de la queue, la DOS est décrite par ses densités d'interception de la limite de la bande de conduction et de la bande de valence et par son énergie de décomposition caractéristique. Pour les distributions gaussiennes, la DOS est décrite par son énergie de pic, son énergie de décomposition caractéristique et sa densité totale d'états [60-63]

Pour le processus de modélisation, un simulateur numérique 2D Silvaco [69] a été utilisé pour modéliser et étudier le comportement de performance de la conception proposée. Cette modélisation numérique est basée sur la solution simultanée des équations de Poisson, des équations de continuité (qui sont considérées comme mécanisme de génération / recombinaison) et des équations de densité de courant pour les électrons et les trous. La densité nette des porteurs de charge est principalement affectée par les densités des trous et des électrons libres, la concentration d'accepteur et de donneurs ionisés et la densité de charge nette due au piégeage de trous et d'électrons dans les états de queue et les états de liaison pendantes[64]. La densité de charge nette peut être calculée à partir des niveaux d'énergie et de la densité totale des donneurs et des accepteurs, ainsi que des concentrations spatiales variables des porteurs libres dans les trois types des cellules solaires.

II.6. Résultats et interprétation

Étant donné que l'étude numérique se concentre sur la quantification de l'impact de la conception proposée sur les performances des cellules solaires (figures II.1, II.2 et II.3), nous menons une investigation de sensibilité basée sur certains paramètres de la conception, afin de comprendre le comportement de la cellule solaire.

Au début de l'élaboration de la cellule solaire proposée à l'aide du simulateur 2D Silvaco, nous devons choisir la structure de simulation soit dans le modèle de densité d'états (DOS), soit le modèle de durée de vie. Le modèle DOS est essentiel lorsqu'il s'agit de matériaux ayant des densités de défauts significatives telles que SiGe amorphe [64]

Dans ce qui suit, on étudie l'effet des paramètres géométriques et électriques sur le rendement de chacun des modèles des cellules solaires. Le rendement doit être le plus élevée possible, alors que le coût des cellules solaires devrait être aussi faible que possible, de sorte que les matériaux à base de silicium amorphes soient utilisés. Les rendements électriques fournis par chacune de ces conceptions de cellules solaires sont examinés en fonction de la concentration du dopage de la tranche, de la fraction molaire du Ge dans la couche intrinsèque à base de a-SiGe, des épaisseurs de différentes couches et des paramètres dimensionnels. On

analyse également les variations des rendements électriques en fonction du nombre de tranches dans la région intrinsèque.

Les courbes (a), (b) et (c) de la figure II.4.1 ci-dessous illustre la variation du rendement pour une cellule solaire mono-jonction en fonction du dopage, la largeur et l'épaisseur de la tranche.

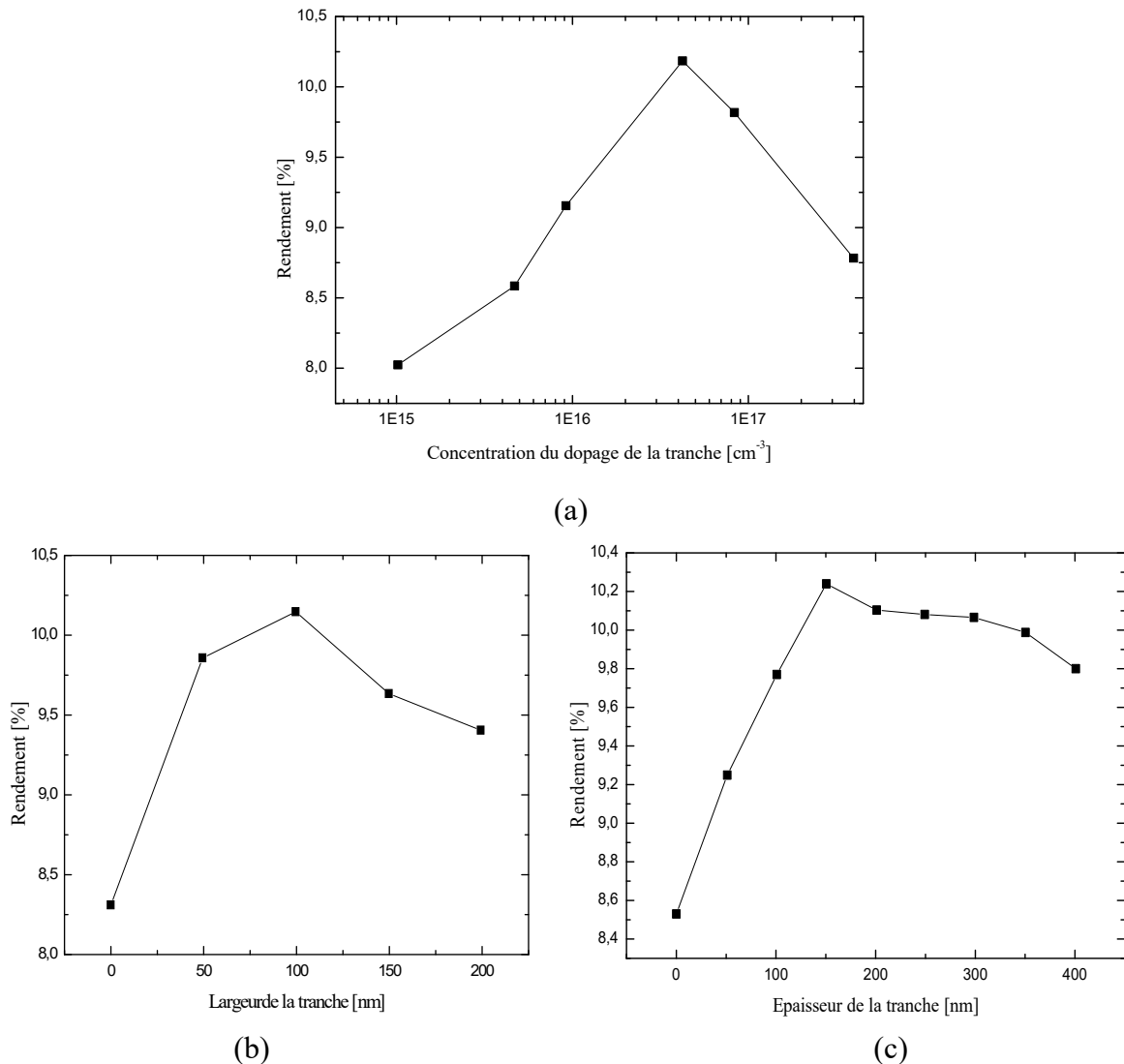
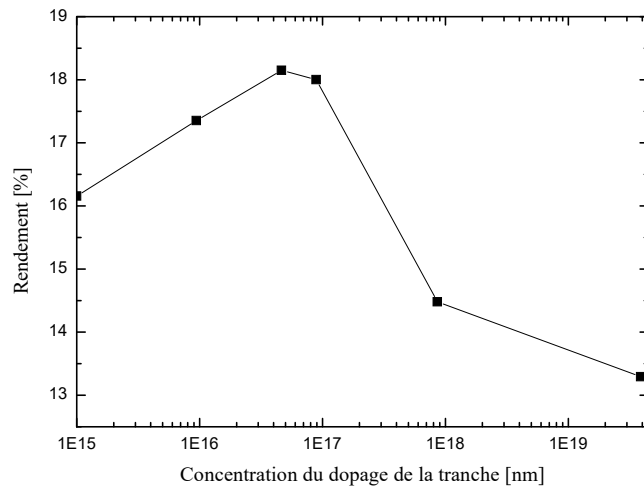


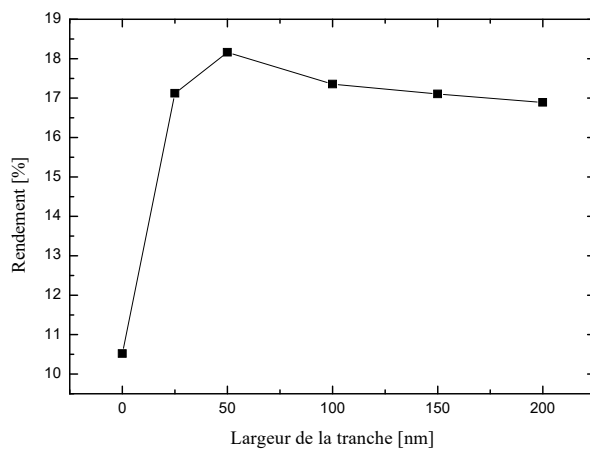
Fig II.4.1 : Cellule solaire mono-jonction

Nous constatons que le rendement est maximum pour un dopage de l'ordre de $4 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$, par contre la largeur optimale se situe dans la gamme 50-100nm alors que le rendement tend à se saturer à partir d'une épaisseur de l'ordre de 150 nm.

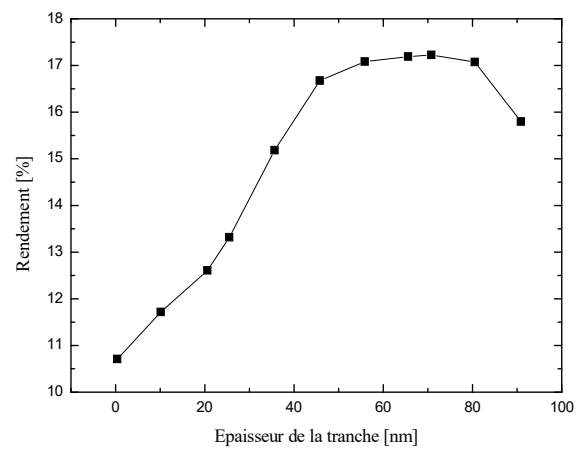
Pratiquement même comportement pour la structure double jonction illustrée par les courbes de la Fig.II.4.2 sauf que le rendement maximum est passé de 10% à environ 18 %.



(a)



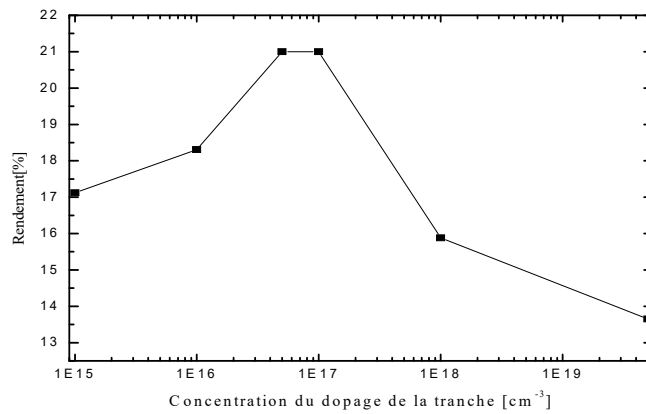
(b)



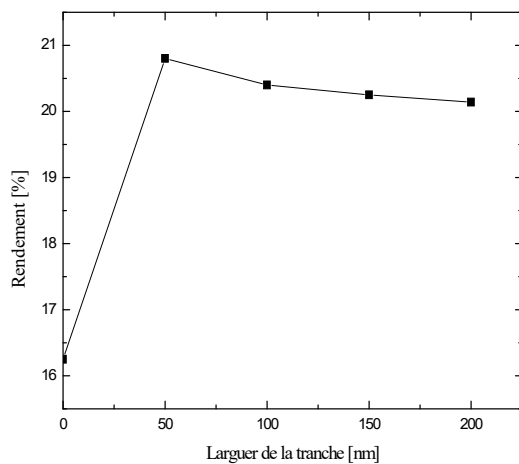
(c)

Fig II.4.2 : Cellule solaire double-jonction

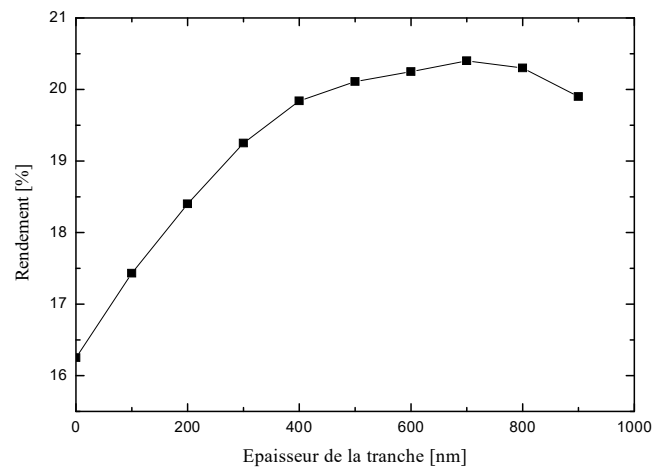
Pour le comportement de la structure triple jonction illustré par les courbes de la Fig. II.4.3, on constate que le rendement maximum a grimpé vers 21% pour un dopage qui se situe dans la gamme $5 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$ et se sature autour de cette valeur pour des largeurs et des épaisseurs à partir de 50 nm pour les premières et 400 nm pour les secondes.



(a)



(b)



(c)

Fig II.4.3: Cellule solaire triple-jonction

Figure II.4 : Variation du rendement des cellules solaires en fonction de (a) la concentration du dopage, (b) la largeur et (c) de l'épaisseur de la tranche.

Les courbes de la figure II.4. indiquent que la conception proposée améliore le rendement électrique par rapport à la structure conventionnelle sans tranches.

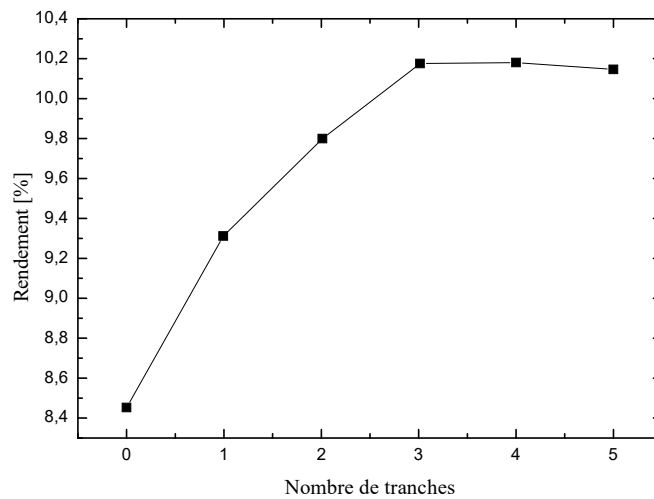
Les valeurs élevées du rendement sont le résultat de l'amélioration du photo-courant, de la réduction de la résistance série et de l'augmentation de la résistance shunt de la cellule solaire conçue. Par conséquent, le champ électrique et la distribution du potentiel dans la région intrinsèque frontale sont considérés comme des paramètres importants pour améliorer le comportement de la cellule solaire. L'utilisation de la région de la tranche de type p dans la couche intrinsèque augmente le nombre de porteurs de charge libre et la conduction électrique dans des conditions opérationnelles et par conséquent la résistance série et le photo-courant sont

modulés, où la meilleure de ces valeurs peut être contrôlée en modifiant les paramètres des multi-tranches.

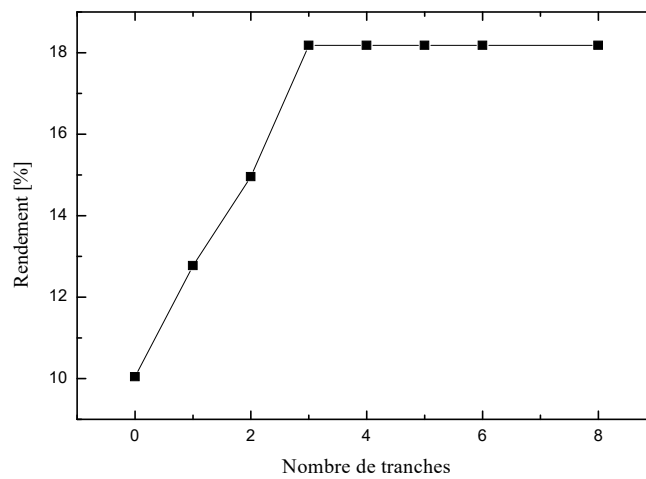
C'est ainsi qu'on a obtenu une augmentation du rendement en fonction de la densité du dopage des tranches (courbes (a)) et cesse dès que la densité du dopage des multi-tranches dépasse une certaine valeur (dans le cas de la cellule solaire double-jonction on a $NA=5.10^{16}$ cm^{-3} , par contre dans le cas de la cellule solaire mono-jonction et la triple-jonction $NA = 4.10^{16}$ cm^{-3}) pour générer une pente négative dans son profil. En outre, le contrôle de la pénétration de la région de déplétion dans les couches P et N peut être assuré par les valeurs du dopage. Ce dernier facteur peut améliorer les paramètres électriques (résistances shunt et série) par rapport aux structures des cellules solaires conventionnelles. La région multi-tranches se présente près de la limite de la jonction frontale près de l'émetteur et de l'absorbeur, donc lorsque la région de tranche type p est située près de l'interface de la jonction, le rendement diminue.

Par conséquent, un emplacement approprié de la région multi-tranches devrait être calculé. Dans cette conception, la position optimale est obtenue au milieu de la région intrinsèque frontale. Lorsque la largeur des multi-tranches est supérieure à une valeur particulière (100 nm dans le cas de la cellule mono-jonction et 50 nm dans le cas de la cellule solaire tandem), la distribution du potentiel dans la région intrinsèque frontale sera distordue et l'effet de la tranche de type p sur l'amélioration de la distribution du champ électrique aux bords de l'émetteur et de la base sera plus bas. Par conséquent, l'effet des largeurs élevées des multi-tranches sur la réduction du champ électrique et la résistance totale (résistances série et shunt) sera diminué. A mesure que la largeur des multi-tranches augmente, la région de déplétion créée par les multi-tranches augmente également. En conséquence, un fort photo-courant est obtenu en augmentant la longueur des multi-tranches. Les valeurs du rendement obtenues en fonction des différentes largeurs et épaisseurs des multi-tranches sont représentées sur les courbes (b) et (c) de la figure II.4.

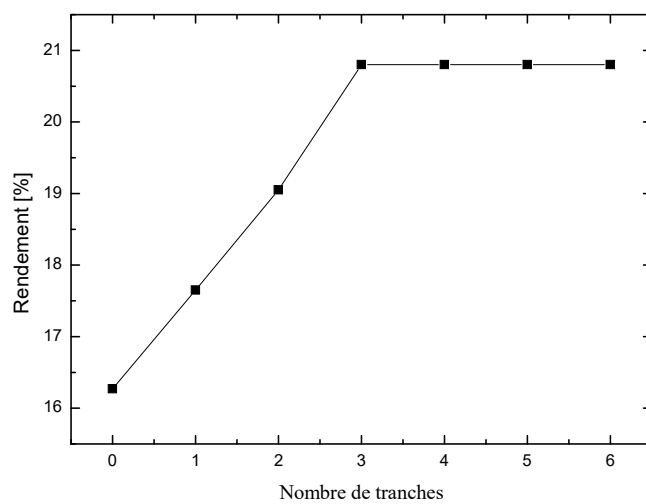
Sur la figure II.5, l'impact du nombre des tranches sur le rendement des cellules solaires est remarquable.



(a)



(b)



(c)

Figure II.5 : Variation du rendement des cellules solaires étudiées en fonction du nombre de tranches selon les trois cas étudiés : (a) mono-jonction, (b) double-jonction et (c) triple-jonction.

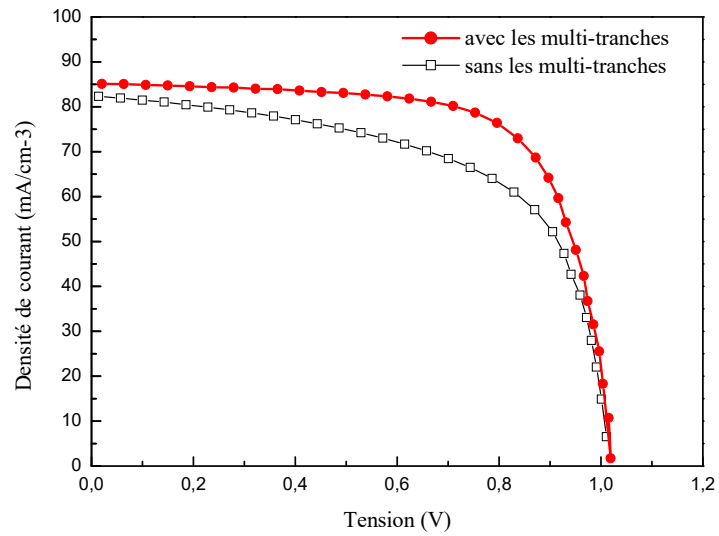
Le nombre de tranches (N) varie de zéro (conception sans tranches) à huit. On peut voir que si N augmente, le rendement augmente à mesure que l'absorption augmente et que la résistance en série diminue, en raison de la modulation de la distribution du champ électrique dans la région intrinsèque frontale. Donc, nous pouvons voir l'importance de l'intégration d'une région multi-tranches, dans la couche intrinsèque frontale, afin de produire de meilleures cellules solaires amorphes double jonction à couche mince. Mais, la tension en circuit ouvert n'est presque pas affectée par le nombre (N) de tranches, qui dépend principalement de la bande interdite du matériau. Cela permet d'augmenter le rendement jusqu'à une valeur maximale d'environ 10,2% pour les cellules solaires mono-jonction, 18,15% pour les cellules solaires double jonction et 21,2% pour les cellules solaires triple-jonction. Par conséquent, le nombre optimal de tranches proposé pour la conception serait égal à trois, pour lequel la valeur significative du rendement atteindra sa valeur maximale.

Afin d'optimiser les cellules solaires, une investigation détaillée est effectuée autour de l'impact de la région multi-tranches sur les performances électriques des différentes configurations des cellules solaires. Le tableau II.1 présente les valeurs optimisées des paramètres de la couche multi-tranches utilisés dans cette étude qui sont obtenues après plusieurs simulations, pour une large gamme des valeurs des paramètres sur la base des valeurs optimisées, d'une cellule solaire double jonction en couches minces à base de SiGe amorphe comprenant une région multi-tranches. Les caractéristiques I-V des cellules solaires proposées et des cellules solaires conventionnelles (sans tranchées) sont retracées sur les figures II.6, où on remarque la baisse de la densité du courant des cellules solaires conventionnelles par rapport aux cellules solaires proposées. À partir de la figure II.6, on remarque que la région multi-tranches a un effet sur le champ électrique de la région de déplétion de la couche intrinsèque. Un faible champ électrique fait décroître la résistance totale avec une augmentation du facteur de forme. Par conséquent, l'étude révèle qu'une augmentation dominante du facteur de forme jusqu'à une limite tolérable de N, de préférence égale à trois (afin de minimiser le rapport prix/rendement), entraînerait une amélioration du rendement.

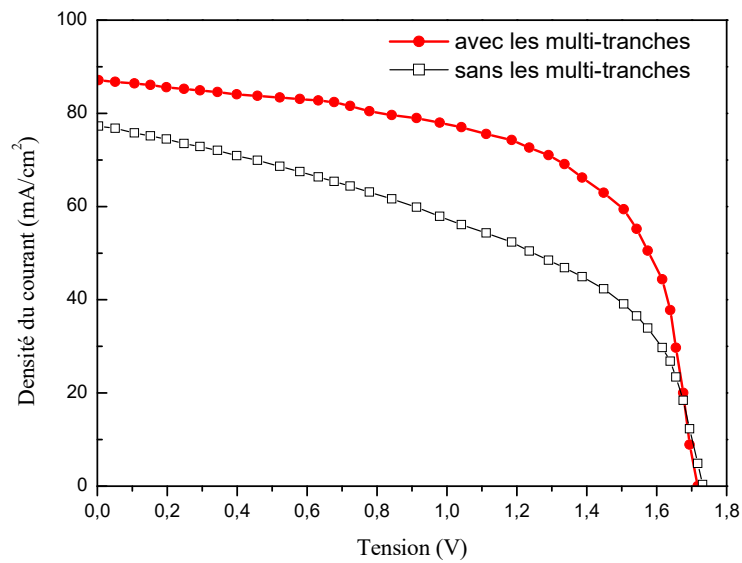
Tableau II.1 : Valeurs des paramètres optimisées des cellules solaires proposées.

Paramètres	Valeurs optimales de la cellule solaire mono-jonction	Valeurs optimales de la cellule solaire double-jonction cellule du haut	Valeurs optimales de la cellule solaire triple-jonction cellule du haut
épaisseur de la région a-Si:H (n)	$t_1=20\text{nm}$	$t_1=20\text{nm}$	$t_1=20\text{nm}$
épaisseur de la région a-Si:H (P)	$t_2=600\text{nm}$		

épaisseur de la région a-Si:H (P ⁺⁺)	t ₃ =100nm		
épaisseur de la région intrinsèque a-Si:H (i)	t ₄ =550nm	t ₂ =950nm	t ₂ =950nm
épaisseur de la région a-Si:H (P ⁺)		t ₃ =50nm	t ₃ =50nm
dopage de la région a-Si:H (n)	N ₁ =5.10 ¹⁶ cm ⁻³	N ₁ =5.10 ¹⁶ cm ⁻³	N ₁ =5.10 ¹⁶ cm ⁻³
dopage de la région a-Si:H (P)	N ₂ =4.10 ¹⁶ cm ⁻³	N ₂ =5.10 ¹⁷ cm ⁻³	N ₂ =5.10 ¹⁷ cm ⁻³
dopage de la région a-Si:H (P ⁺⁺)	N ₃ =10 ¹⁹ cm ⁻³		
fraction molaire en Ge (a-Si:H(i))	x=0.1		
largeur de la tranche	t ₅ =100nm	t ₄ =50nm	t ₄ =50nm
épaisseur de la tranche	t ₆ =150nm	t ₅ =700nm	t ₅ =700nm
dopage de la tranche a-Si:H (P)	N ₄ =5.10 ¹⁶ cm ⁻³	N ₃ =4.10 ¹⁶ cm ⁻³	N ₃ =4.10 ¹⁶ cm ⁻³
Nombre de tranche (N)	N=3		N=3
ITO		t ₆ =10nm	
		cellule du bas	cellule du milieu
épaisseur de la région a-Si:H (n)		t ₇ =50nm	t ₇ =50nm
épaisseur de la région intrinsèque a-Si:H (i)		t ₈ =250nm	t ₈ =650nm
épaisseur de la région a-Si:H (P ⁺)		t ₉ =50nm	t ₉ =50nm
dopage de la région a-Si:H (n)		N ₄ =5.10 ¹⁶ cm ⁻³	N ₄ =5.10 ¹⁹ cm ⁻³
dopage de la région a-Si:H (P ⁺⁺)		N ₅ =10 ²⁰ cm ⁻³	N ₅ =10 ²⁰ cm ⁻³
fraction molaire en Ge (a-Si:H(i))		x=0.5	x=0.4
ITO		t ₆ =10nm	
			cellule du bas
épaisseur de la région a-Si:H (n)			t ₁₁ =50nm
épaisseur de la région intrinsèque a-Si:H (i)			t ₁₂ =250nm
épaisseur de la région a-Si:H (P ⁺)			t ₁₃ =50nm
dopage de la région a-Si:H (n)			N ₆ =5.10 ¹⁹ cm ⁻³
dopage de la région a-Si:H (P ⁺⁺)			N ₇ =10 ²⁰ cm ⁻³
fraction molaire en Ge (a-Si:H(i))			x=0.5



(a)



(b)

Figure II.6 : Caractéristiques I-V des cellules solaires à multi-tranches optimisées par rapport aux cellules solaires conventionnelles : (a) mono-jonction et (b) double-jonction.

Tableau II.2 : Performances optimisées des cellules solaires proposées : (a) mono-jonction, (b) double-jonction, (c) triple-jonction.

Paramètres	I _{cc} (mA/ cm ²)	V _{oc} (V)	F.F.	Rendement (%)	Résistances séries (R _s)	Résistance Shunt (R _{sh})
Cellule solaire mono-jonction						
conventionnelle sans tranches [58]	8.2	1.016	0.59	8.47	3.46	37.24
à multi-tranches	8.59	1.022	0.7	10.16	2.73	72.77
Amélioration relative (%)	4.75	0.6	18.6	20	21.1	95.4
Cellule solaire double-jonction						
sans tranches	7.74	1.73	0.47	10.70	8.54	44.00
à multi-tranches	8.70	1.73	0.72	18.15	3.37	130.90
Amélioration relative (%)	12.40	0	53.10	69.60	60.50	197.40
Cellule solaire triple-jonction						
sans tranches [70]	7.05	2.48	0.56	16.2		
a-Si:H/a- SiGe:H/nc-Si:H [48]	9.43	2.24	0.77	16.3		
Cellule étudiée	7.01	2.50	0.71	21.2		

La comparaison entre les performances des cellules solaires conventionnelle et les cellules solaires à multi-tranches optimisées, est détaillée sur les tableau II.2 où on constate clairement que dans le cas de la cellule solaire mono-jonction (tableau II.2 (a)), la fraction molaire du Ge et des paramètres des cellules solaires appropriées (de chaque couche et de chaque tranche), le rendement de la cellule solaire mono-jonction en couches minces à base de SiGe amorphe augmente de 20% par rapport à la cellule solaire conventionnelle. Un rendement maximal de 10,16% a été atteint, avec une densité du courant de court-circuit de 8,6 mA / cm², la tension en circuit ouvert de 1,022 V et un facteur de forme de 0,7. La résistance totale subit aussi des améliorations qui se présentent comme suit : La résistance shunt augmente de 37,24

Ω (la structure conventionnelle) à $72,77 \Omega$ (la conception proposée), ce qui se traduit par une amélioration de 95,4%. En outre, la résistance série diminue de $3,46 \Omega$ (la structure conventionnelle) à $2,73 \Omega$ (la conception proposée).

En passant à la structure de la cellule solaire double-jonction à base de SiGe amorphe (Tableau II.2. (b)), le rendement augmente de 69,6% par rapport à la cellule solaire conventionnelle à couches minces. Le rendement maximal de 18,15% est atteint, avec la densité du courant de court-circuit de $8,7 \text{ mA} / \text{cm}^2$, la tension en circuit ouvert de 1,73 V et le facteur de forme de 0,72. D'autres améliorations sont observables au niveau de la résistance totale (résistances shunt et série). La résistance shunt de la structure conventionnelle est de 44Ω , tandis que la conception proposée bénéficie d'une augmentation qui atteint $130,9 \Omega$, ce qui signifie une amélioration de 197,4%. Concernant la résistance série de la structure conventionnelle de valeur est égale à $8,54 \Omega$, elle diminue jusqu'à ce qu'elle atteigne $3,37 \Omega$ (la conception proposée).

En poursuivant avec la cellule solaire triple-jonction en couches minces (tableau II.2 (c)), le rendement a augmenté de 25% par rapport aux structures conventionnelles. Un rendement de 21,2% est atteint, avec la densité du courant de court-circuit de $7 \text{ mA}/\text{cm}^2$; la tension en circuit ouvert de 2,5V et le facteur de forme de 0,71.

Cela signifie que les conceptions proposées jouissent des performances électriques élevées par rapport aux structures conventionnelles.

II.7. Conclusion

L'étude numérique et l'optimisation des différents paramètres physiques et géométriques des structures proposées en couches minces à base de SiGe, nous ont permis d'améliorer les performances électriques, grâce à la nouvelle approche concernant l'insertion de multi-tranches dans la couche intrinsèque (en SiGe) introduite dans la structure. Cela a permis d'améliorer les rendements de chaque type de cellules solaires, soit les mono-jonctions ou les tandems. Cette amélioration des performances conduit à maximiser le rendement (rendement/ coût de fabrication). Malheureusement, le déséquilibre au niveau du réseau entre les couches du Si et du SiGe peut entraîner une formation de dislocation et des défauts d'interface, ce qui affecte les performances de transport d'électrons. Aucun de ces effets n'a été pris en considération dans ce chapitre. Dans ce contexte, afin de poursuivre le même objectif, l'impact des défauts d'interfaces sur les performances des cellules solaires en couche mince sera mis sous projection au prochain chapitre.

Chapitre III

Impact des défauts d'interface de l'hétéro-structure SiGe/Si

III.1. Introduction	46
III.2. Première partie : Etude numérique de l'hétéro-structure SiGe/Si incluant les défauts d'interfaces pour des applications photovoltaïques.....	47
III.2.1. Structure proposée et simulations numériques	48
III.2.2. Résultats et interprétations.....	50
III.3. Seconde partie : Le rôle du profil de concentration de Ge non-uniforme dans l'amélioration du rendement des cellules solaires à hétérojonction basées sur leSiGe/Si	53
III.3.1. Principe de l'approche proposée.....	54
III.3.2.Présentation et interprétation des résultats	57
III.4. Conclusion	62

III.1. Introduction

Afin d'améliorer les performances électriques et réduire le coût de fabrication de la cellule solaire, les concepts de cellules solaires à couche mince sont largement explorés.

Dans ce contexte, de nombreuses recherches ont été menées pour étudier l'impact de la diminution de l'épaisseur du matériau sur le comportement des cellules solaire afin de produire des cellules photovoltaïques à haut rendement [72-74].

Récemment, l'hétéro-structure $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ est considérée comme une alternative attrayante pour les applications photovoltaïques en raison de la structure de leurs bandes d'énergies, qui se répercute sur l'amélioration du rendement de la cellule solaire. Cependant, la croissance de ce matériau n'est pas totalement contrôlée, et la présence de défauts d'interfaces est plus qu'estimée après un cycle de croissance du matériau. Par conséquent, de nouvelles recherches expérimentales et numériques qui canalisent le comportement de l'hétéro-structure $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ sont développées afin de construire un modèle de cellule solaire à base de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ complet pour les applications photovoltaïques.

En effet, l'introduction du SiGe permet de moduler la fenêtre optique par l'ingénierie de la bande interdite suggérée par l'éventuelle teneur de la fraction molaire du Ge dans le matériau SiGe [75, 76]. Cela peut ouvrir la voie à un meilleur rendement de conversion grâce l'amélioration du comportement d'absorption de l'alliage SiGe dans la gamme du spectre proche-infrarouge [77-83]. Malgré cette amélioration, le rendement de la conversion est encore faible en raison de la dégradation des performances induite par les dislocations, qui sont principalement attribuées au grand désaccord de maille entre les deux matériaux Si et Ge [83, 84]. Dans ce contexte, plusieurs études expérimentales ont confirmé le contrôle difficile de la croissance du SiGe sur le matériau Si, où une densité de pièges élevée localisée au niveau du Si/SiGe peut se produire [82-84].

Malgré cela, l'incapacité à surmonter le compromis entre la suppression des effets de dégradation liés aux dislocations et l'amélioration du rendement des cellules solaires à base de Si/SiGe persiste et n'a pas encore de solution claire.

A travers ce chapitre, nous allons dévoiler les conséquences résultantes de l'admission de la couche de SiGe à teneur constante de fraction molaire de Germanium au sein de l'hétéro-structure SiGe/Si, ainsi que les effets portés par l'insertion de la couche de SiGe à teneur graduelle de Ge variant de 0% à 100%, sur les cellules solaire en couche mince à base de SiGe, à travers deux parties.

La première partie vise à souligner l'impact de défauts d'interface au niveau nanométrique (simuler à l'aide du simulateur Atlas 3-D) sur le comportement de la cellule solaire (hétéro-structure $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$).

Dans la seconde partie se trouve la solution du problème cité ci-dessus, via l'utilisation de couche de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ à teneur graduelle en germanium ($0 < x < 1$).

III.2. Première partie : Etude numérique de l'hétéro-structure SiGe/Si incluant les défauts d'interfaces pour des applications photovoltaïques.

La cellule solaire à base de SiGe est très prometteuse pour les applications photovoltaïques à haut rendement [79, 80]. L'utilisation d'un matériau à faible bande, dans la région de base active de la cellule solaire à hétérojonction, à base de SiGe, est un candidat potentiel étant donné leur compatibilité avec le procédé développé pour les cellules de Si pur [78].

En outre, la forte augmentation du photo-courant en raison de l'absorption accrue de la lumière proche-infrarouge dans le matériau de SiGe est attendue. Cependant, la croissance de ce matériau n'est pas totalement contrôlée, et la présence de défauts est plus que prévu après un cycle de croissance de ce matériau.

En outre, une chute de la tension en circuit-ouvert ne peut pas, non plus être évité en raison de l'augmentation de la concentration intrinsèque du support due à la plus petite bande de SiGe que celle du Si [83, 84].

Par conséquent, afin d'obtenir une vision globale de la performance des cellules solaires basées sur le SiGe dans des conditions critiques, les approches numériques d'investigation et d'optimisation sont indispensables pour la compréhension des fondamentaux de ces caractéristiques. De plus, en fonction de ces approches, il est possible de déterminer quels sont les paramètres les plus susceptibles de provoquer des défaillances critiques au niveau des performances des cellules solaires.

Sur la base de l'analyse numérique d'une cellule solaire hétéro-structure, comprenant les défauts d'interface dans la région active, le modèle numérique des caractéristiques courant-tension, en incluant les défauts d'interface, après avoir considéré l'approximation de la fonction uniforme pour la distribution des défauts d'interface, est élaboré afin de

développer l'immunité de la structure solaire de la cellule solaire à base de SiGe contre les défauts.

Les modèles numériques proposés seront utilisés comme fonction objective pour optimiser les performances électriques des cellules solaires à base de SiGe.

L'idée clé de cette approche est de trouver de meilleures dimensions ainsi que des paramètres électriques de la cellule solaire étudiée pour faciliter et améliorer la stratégie de conception des circuits photovoltaïques.

L'optimisation de la conception, qui est adoptée dans ce travail, consiste à trouver le maximum de rendement de conversion de puissance (PCE) appelée fonction objective et doit également satisfaire un certain nombre d'exigences spécifiées dans les contraintes [54-57].

III.2.1. Structure proposée et simulations numériques

Sur la figure III.1, la vue schématique en coupe transversale de la cellule solaire de l'hétéro-structure SiGe/Si étudiée est illustrée. Les techniques de procédé de fabrication utilisées pour élaborer ce dispositif sont bien représentées dans [65].

Le profil de dopage de la cellule solaire de l'hétéro-structure SiGe/Si dans chaque couche est conçu et déterminé par le gaz in-situ dans la chambre pendant le procédé de fabrication. La concentration du Ge dans la couche mince de SiGe peut être vérifiée par différentes méthodes, telles que la microanalyse aux rayons X (EXD) et les spectres Raman [62-64]. Après le dépôt de différentes couches de film mince de Si et de SiGe conçues, un film d'oxyde d'étain d'indium (ITO) peut être formé en tant que couche antireflet (AR) par pulvérisation cathodique [62-64]. Le contact du champ de la surface arrière peut être formé en imprimant l'aluminium (Al) collé sur la face arrière de la cellule solaire, tandis que le contact avant des doigts inter-dégités peut être disposé, en tirant de l'argent collé dans le film ITO [61].

Les défauts de l'interface sont situés sur toute l'interface SiGe/Si et peuvent être exprimés par des charges positives [80]. Il faut noter que la recombinaison des porteurs sur les défauts est le principal phénomène limitant la performance des cellules solaires. Par conséquent, les approches numériques d'investigation et d'optimisation, y compris les effets de défauts d'interface, sont indispensables, afin d'améliorer la qualité du matériau SiGe et d'améliorer ainsi le rendement des cellules solaires de l'hétéro-structure SiGe/Si.

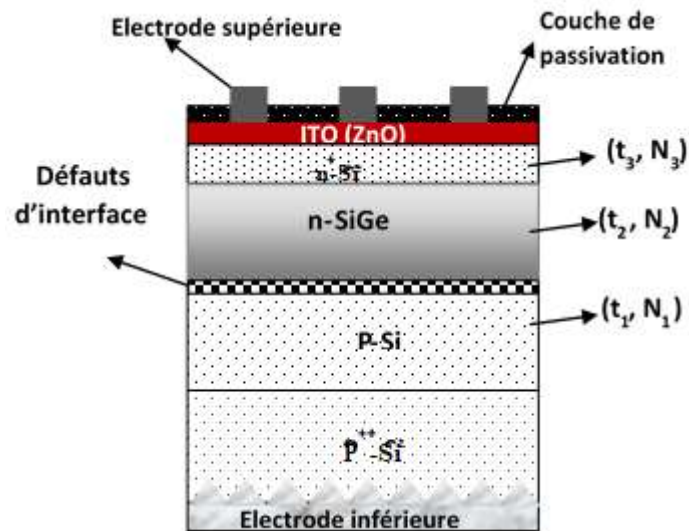


Figure III.1 : Coupe transversale de la cellule solaire hétéro-structure à base de SiGe/Si proposée.

Tableau III.1 : Les valeurs des paramètres de conception utilisées pour la simulation numérique ($N_f=10^{12} \text{ cm}^{-3}$).

Paramètres	Valeurs
dopage de la région Si (p-Si)	$N_1=10^{15} \text{ cm}^{-3}$
dopage de la région SiGe (n-SiGe)	$N_2=10^{16} \text{ cm}^{-3}$
dopage de la région Si (n^+ -Si)	$N_3=10^{17} \text{ cm}^{-3}$
épaisseur de la région Si (p-Si)	$t_1=100 \text{ nm}$
épaisseur de la région SiGe (n-SiGe)	$t_2=50 \text{ nm}$
épaisseur de la région Si (n^+ -Si)	$t_3=5 \text{ nm}$
Fraction molaire en Ge	0.2

Au cours du processus de simulation, l'impact des paramètres de conception sur la performance électrique de la cellule solaire proposée est étudié, sous une source lumineuse du simulateur solaire AM 1.5 (100 mW/cm^2) et à température ambiante.

Dans le tableau III.1, les différents paramètres de conception utilisés pour la simulation sont résumés, avec le maximum d'effets introduits dans l'étude numérique pour tenir compte de contraintes supplémentaires telles que la mobilité dépendante du champ qui est nécessaire pour modéliser l'effet de saturation de la vitesse.

III.2.2. Résultats et interprétations

Sur la figure III.2, les caractéristiques I-V de la cellule solaire étudiée, y compris les défauts d'interface, présentent clairement un décalage des courbes du photo-courant sous l'influence des différentes intensités des défauts d'interface.

Ce résultat signifie que le courant direct dans les cellules solaires à base de SiGe est dominé par un mécanisme de recombinaison à un niveau profond.

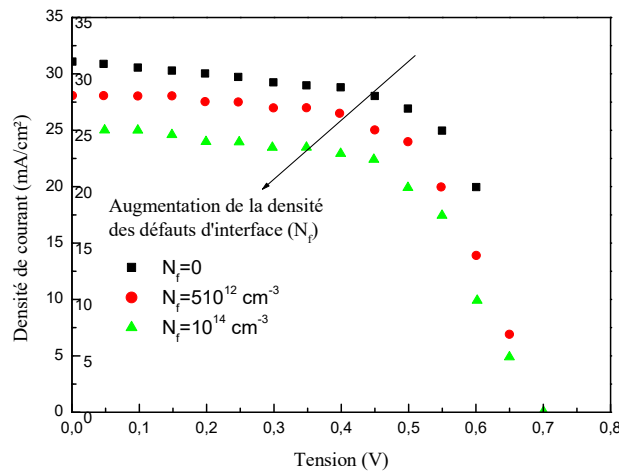


Figure III.2 : Courbes caractéristique I-V pour différentes valeurs de densité de défaut d'interface.

Sur la base du comportement variable du photo-courant en fonction des défauts d'interface, nous pensons qu'il est possible de déterminer l'équation du comportement général, qui décrit la variation de la dégradation du photo-courant (I_{phd}), en tenant compte des effets des défauts de l'hétéro-structure SiGe/Si. Nous pouvons voir cette expression dans l'équation (III.1) ci-dessous,

$$I_{phd} = I_{ph0} - aN_f \quad (\text{III.1})$$

Avec I_{deg} représente le courant de dégradation donné par : $I_{deg} = aN_f$.

I_{phd} représente le photo-courant global (incluant les effets de la dégradation), I_{ph0} est le photo-courant, a représente un paramètre d'ajustement et N_f est la concentration de défauts d'interface.

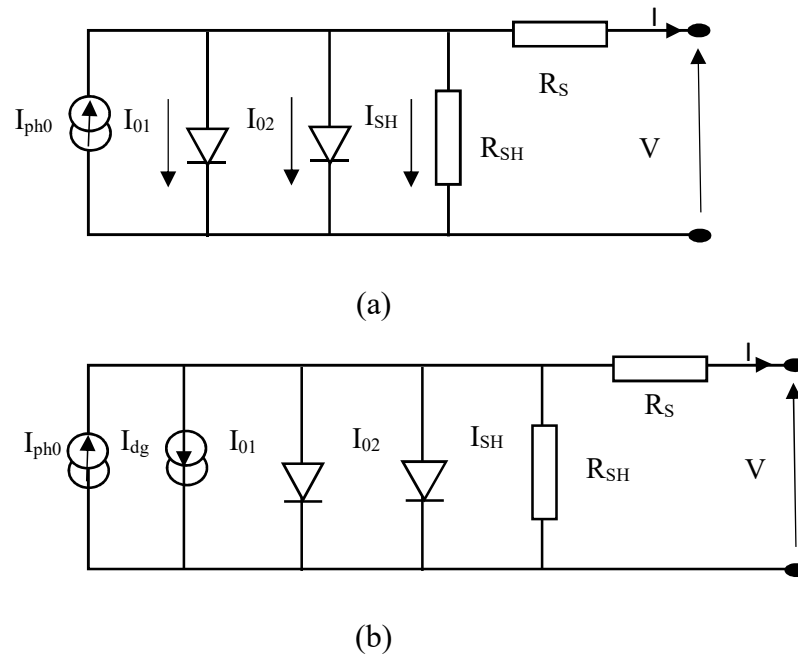


Figure III.3 : Circuit électrique équivalent de la cellule solaire (a) avant l'implantation de notre modèle et (b) après l'implantation du modèle de la dégradation.

Les modèles existants de la cellule solaire dans les simulateurs électroniques (Silvaco, PC1D, ..) ne prennent pas en compte le phénomène de dégradation des défauts d'interfaces. Ce dernier est purement expérimental et très efficace dans le traitement des phénomènes de vieillissement et de fiabilité. Compte tenu de l'importance de ces phénomènes, nous avons développé un modèle lié à l'effet de dégradation. Le circuit électrique équivalent de la cellule solaire avant et après la mise en place de l'effet de dégradation des défauts est représenté sur la figure III.3. Sur cette figure, les paramètres des cellules solaires sont donnés par: I_{ph0} représente le photo-courant sans effet de dégradation; I_{deg} est le courant de dégradation, qui dépend principalement des défauts d'interfaces, R_s et R_p représentent respectivement la résistance série et la résistance parallèle, I_{01} et I_{02} sont les densités de courant inverse pour les deux diodes.

Dans cette partie, nous proposons une approche basée sur l'algorithme génétique (GA : Genetic Algorithm) afin d'améliorer les performances et la fiabilité des dispositifs, y compris les effets des défauts d'interface pour les applications photovoltaïques. Dans le but d'optimiser les performances électriques de la cellule solaire étudiée par GA, des routines et des programmes pour le calcul des GA ont été développés en utilisant MATLAB 7.2, et toutes les simulations ont été réalisées sur un ordinateur Pentium IV 3 GHz de 1 Go. Un processus d'optimisation a été réalisé pour une taille de population de 20 et un nombre maximum de générations égal à 100, pour lequel la stabilisation de la fonction de fitness a

été obtenue. La base de données utilisée pour l'optimisation de la configuration de la cellule solaire est développée en utilisant SILVACO 2D [69]. Les paramètres de l'algorithme génétique multi-objectif (MOGA : Multi-Objective Genetic Algorithm) (voir annexe A) ont été modifiés et l'erreur d'optimisation associée a été enregistrée. Pour la configuration optimisée, la fonction objective globale était de $2,70 \times 10^{-3}$ et presque 100%, des cas soumis ont été appliqués correctement. La diminution constante du rendement de conversion de puissance (the power conversion efficiency : PCE) de la meilleure solution à chaque génération (jusqu'à atteindre la meilleure valeur possible) peut être attribuée à la procédure de sélection utilisée, c'est-à-dire une sélection de roue de tournoi. Les paramètres optimaux des cellules solaires optimisées sont résumés dans le tableau III.2.

L'approche basée sur l'algorithme génétique développée peut être utilisée comme interface entre la modélisation des cellules solaires et les simulateurs des circuits tels que SPICE et PC1D afin d'optimiser les performances du circuit photovoltaïque. Un aperçu simplifié est arboré sur la figure III.4.

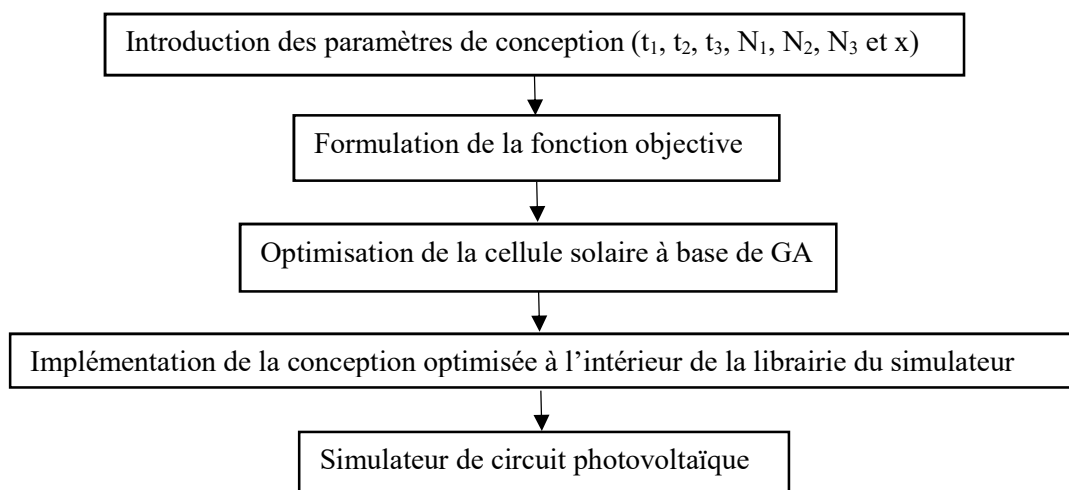


Figure III.4 : Approche proposée pour l'optimisation du circuit photovoltaïque.

Tableau III.2 : Paramètres de conception de cellule solaire optimisés ($N_f=10^{12} \text{ cm}^{-3}$).

Paramètres de conception	Conception sans optimisation	Conception optimisée
Dopage de la région Si (p-Si)	$N_1=10^{15} \text{ cm}^{-3}$	$N_1=4 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$
Dopage de la région SiGe (n- SiGe)	$N_2=10^{16} \text{ cm}^{-3}$	$N_2=8 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$
Dopage de la région Si (n^+ -Si)	$N_3=10^{17} \text{ cm}^{-3}$	$N_3=5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
Epaisseur de la région Si (p-Si)	$t_1=100 \text{ nm}$	$t_1=90 \text{ nm}$
Epaisseur de la région SiGe (n- SiGe)	$t_2=50 \text{ nm}$	$t_2=38 \text{ nm}$
Epaisseur de la région (n^+ -Si)	$t_3=5 \text{ nm}$	$t_3=8 \text{ nm}$
Fraction molaire en Ge	$x=0.2$	$x=0.1$
Fonction objective		
Rendement (%)	12.4	14.8

Après avoir proposé, une étude numérique complète et efficace sur le plan informatique afin d'étudier l'immunité de la cellule solaire $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ contre l'effet de dégradation des défauts au niveau de l'échelle nanométrique. Les modèles numériques ont été utilisés pour prédire la performance et l'immunité du dispositif contre les effets des défauts, où le comportement des caractéristiques de la cellule solaire à base de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ montre que la dégradation de la performance électrique est due aux effets de défauts d'interface.

Par conséquent, des approches alternatives sont en fait requises et restent inévitables pour améliorer les performances optiques et électriques des cellules solaires à base de Si/SiGe.

Intuitivement, l'utilisation d'une couche de SiGe avec une teneur graduelle en germanium associée à l'augmentation de l'épaisseur de la couche de SiGe peut être une solution substantielle pour éviter la densité de défauts, dans le but d'améliorer les performances électriques des cellules solaires à hétéro-structure $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$. Cette approche est présentée dans la partie qui suit avec plus de détails

III.3. Seconde partie : Le rôle du profil de concentration de Ge non-uniforme dans l'amélioration du rendement des cellules solaires à hétérojonction basées sur le SiGe/Si

L'utilisation d'une couche de SiGe avec une concentration de Ge graduée au lieu d'un alliage de SiGe à couche mince est une solution avantageuse, puisqu'elle offre l'opportunité de réduire le décalage de maille à l'interface Si/SiGe. Ce qui permet d'éliminer l'effet de la dégradation lié aux dislocations, afin d'améliorer le rendement de la photo-conversion des cellules solaires à base de Si/SiGe.

Accompagner d'une analyse minutieuse, l'étude numérique démontre l'impact de l'utilisation de la couche de SiGe à teneur de Ge graduelle, ainsi que la variation de l'épaisseur de la couche de SiGe, sur le rendement de conversion des cellules solaires.

De plus, l'augmentation progressive de la teneur en Ge, suggère l'aspect de modulation de la bande interdite qui permet d'améliorer l'absorption optique des cellules solaires et la résistance totale.

Par conséquent, la conception proposée jette la lumière sur une nouvelle voie, la prohibition des pertes suite aux effets de recombinaison, grâce à la suppression des effets de dislocation liés à la dégradation, qui est une éventuelle alternative pour des cellules solaires à base de Si à haut rendement.

Le but est principalement de diminuer la densité des défauts d'interface entre le Si/SiGe par l'augmentation progressivement du Ge à l'égard de l'épaisseur du film absorbeur de SiGe.

III.3.1. Principe de l'approche proposée

L'étude expérimentale a démontré la difficulté de contrôler la présence des défauts d'interface ou la localisation de la densité des pièges, durant la croissance de la couche de SiGe sur la couche de Si.

A partir de la fine coupe transversale de la cellule solaire à base de Si/SiGe proposée et représentée sur la figure III.5 , on remarque que la partie la plus importante dans la structure étudiée est l'insertion du film absorbeur de SiGe en teneur de Ge amplifiée graduellement, suivi de l'évolution de l'épaisseur de la même couche, afin d'atteindre son maximum, associé à la cristallisation du Ge à l'interface SiGe/P-Si.

La structure proposée est une hétérojonction P-N où le film absorbeur du SiGe est empilé sur la couche de Si. De plus, une région en Si fortement dopée où se crée une barrière de potentiel sur la face arrière de la cellule solaire, formant ainsi un champ électrique de surface (a back surface field contact : BSF) qui agit comme réflecteur d'électrons, assurant ainsi un bon contact avec le contact métallique arrière qui peut être conçu en aluminium (Al). Tandis que le contact avant prend l'aspect des doigts inter-dégités déposé sur la couche (Indium Tin Oxide : ITO), qui se comporte comme un parfait oxyde transparent conducteur (transparent conductive oxide : TCO).

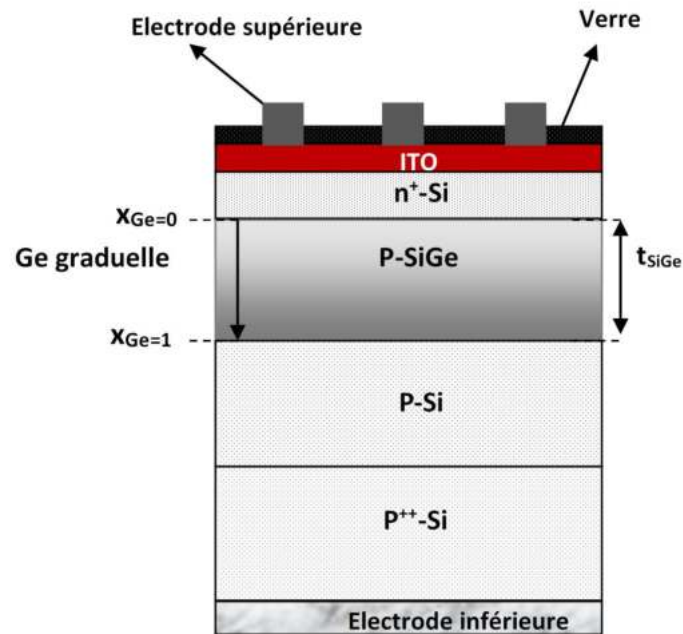


Figure III.5 : Vue de la coupe transversale de la cellule solaire hétéro-structure à base de SiGe/Si avec fraction molaire graduelle en Ge

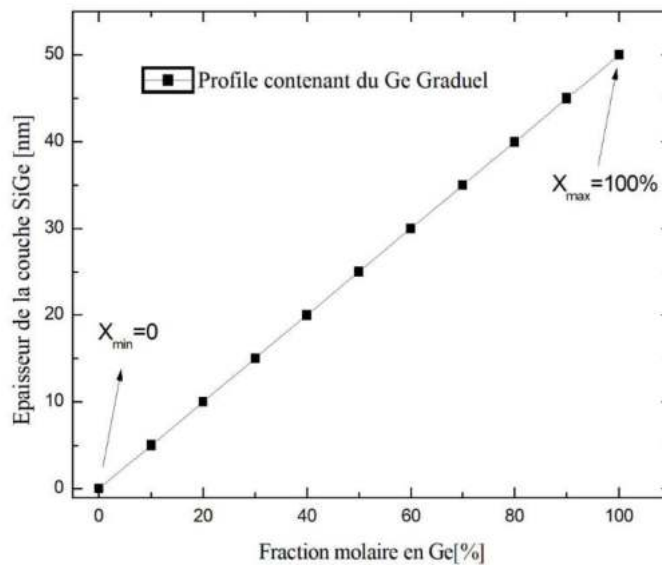


Figure II.6 : Profil de la fraction molaire graduelle en Ge dans le film absorbant du SiGe

D'après la figure III.5, le paramètre t_{SiGe} symbolise l'épaisseur de la couche de SiGe, x_{Ge} la fraction molaire de Ge et N_{SiGe} indique la concentration de dopage du film absorbant en SiGe. De plus, le profil de teneur graduelle en Ge en fonction de l'épaisseur de SiGe optée dans la conception proposée en SiGe/Si est considéré avec un modèle linéaire, tel que décrit dans la figure III.6, où x_{min} et x_{max} sont les limites maximum et minimum de la fraction molaire de Ge de la couche SiGe étudiée, respectivement.

De toute évidence, la modélisation précise de la cellule solaire proposée à base de SiGe/Si, impliquant l'aspect de la fraction molaire graduelle en Ge, requiert la variation des propriétés optiques du film absorbeur en SiGe dans la direction verticale. Ce fait peut conduire au niveau de la modélisation, associée au comportement d'absorption de la cellule solaire et à la complexité du transport des porteurs photo-générés dans la couche de SiGe étudiée. En outre, une modélisation minutieuse de la dégradation de la cellule solaire incluant les effets de dislocation, implique des systèmes complexes d'équations, résultent de la nécessité de prendre en compte le piégeage des porteurs de charge photo-générée à l'interface Si/SiGe. Suite à cette ampleur, les équations non linéaires infligent plusieurs problèmes mathématiques, ce qui peut à son tour causer certaines difficultés pour l'éventuelle modélisation analytique de la conception de la cellule solaire proposée. Suite aux raisons avancées ci-dessus, les techniques numériques peuvent être la meilleure solution pour traiter ces problèmes critiques, ce qui permet de modéliser avec précision les performances optiques et électriques des cellules solaires à hétérojonction à base de SiGe/Si étudiées.

Dans ce contexte, le simulateur des dispositifs ATLAS 2D utilisant les modules LUMINOUS et BLAZE est apparu ces dernières années comme un outil puissant et réaliste pour la modélisation des cellules solaires, impliquant les alliages, ainsi que, la précision d'analyse des cellules solaire, liée aux effets de dégradation causées par les dislocations [66]. De même, il offre la possibilité de prédire la dégradation de la performance des cellules solaires, incluant la densité des pièges pour diverses interfaces de matériaux. Les effets de dégradation liés aux dislocations sont associés à l'aide des commandes INTDEFECTS et INTERFACE, qui permettent de prendre en compte la présence de la densité des pièges au niveau de l'interface SiGe/Si, pouvant ainsi dégrader fortement les performances électriques de la cellule solaire étudiée.

Il est important de signaler que dans le modèle numérique développé, le célèbre modèle de transport par dérive-diffusion est exploité pour modéliser le transport des porteurs de charge dans la cellule solaire à base de SiGe/Si étudiée. De plus, des modèles de mécanisme de recombinaison dominant dans le silicium (Shockley-Read-Hall : SRH), Auger et recombinaison de surface) sont également adoptés [85]. En fait, la mobilité des porteurs de charge, dépend notamment de trois effets (dépendance du champ électrique transversal et parallèle, dopage et effet de température) [72-76]. En outre, la dégradation de la mobilité des porteurs de charge en fonction du niveau de dopage du canal est prise en compte et le modèle de rétrécissement de la bande interdite (Band gap Narrowing : BGN)

est également utilisé en simulation. Au cours de l'étude numérique, l'impact des paramètres de conception proposés, tels que l'épaisseur de couche de SiGe, sur le rendement des cellules solaires est analysé ; avec une source lumineuse du simulateur solaires AM 1,5 ($100\text{mW}/\text{cm}^2$).

Tableau III.3 : Valeurs des paramètres de conception utilisées pour la simulation numérique.

Paramètresde conception	Valeurs
Epaisseur de la région Si (n^+)	$t_{n-Si}=5\text{nm}$
Epaisseur de la région SiGe (n)	$t_{SiGe}=50\text{nm}$
Epaisseur de la région Si (P)	$t_{p-Si}=100\text{nm}$
Epaisseur de la région Si (P^+)	$t_{p^+-Si}=200\text{nm}$
Dopage de la région Si (n^+)	$N_{n-Si}=10^{17}\text{cm}^{-3}$
Dopage de la région SiGe (n)	$N_{SiGe}=10^{15}\text{cm}^{-3}$
Dopage de la région Si (P)	$N_{p-Si}=10^{17}\text{cm}^{-3}$
Dopage de la région Si (P^+)	$N_{p^+-Si}=5\times 10^{17}\text{cm}^{-3}$
Fraction molaire de Ge (SiGe (n^+))	$x_{Ge}=20\%$
Fraction molaire minimum de Ge	$X_{\min}=0\%$
Fraction molaire maximale de Ge	$X_{\max}=100\%$

A travers le tableau III.3, on retrouve les valeurs des paramètres utilisés dans la simulation numérique, de la conception de la cellule solaire étudiée, d'où on fixe l'épaisseur du film absorbeur en SiGe à 50nm. Par ailleurs, certains paramètres de la conception variés afin d'avoir une vue intégrale sur le comportement électrique de la cellule solaire proposée, quand le profil de la fraction molaire de Ge est fixe.

Au début, l'épaisseur du film absorbeur de SiGe est variable entre 25nm et 200nm, avec un pas de 25nm afin d'évaluer les performances de la cellule solaire étudiée avec précision, on incorpore l'effet de la dégradation liée aux dislocations.

III.3.2.Présentation et interprétation des résultats

L'objective derrière la modification de la couche du SiGe en teneur graduelle de Ge est d'éviter l'effet de dégradation liée aux dislocations.

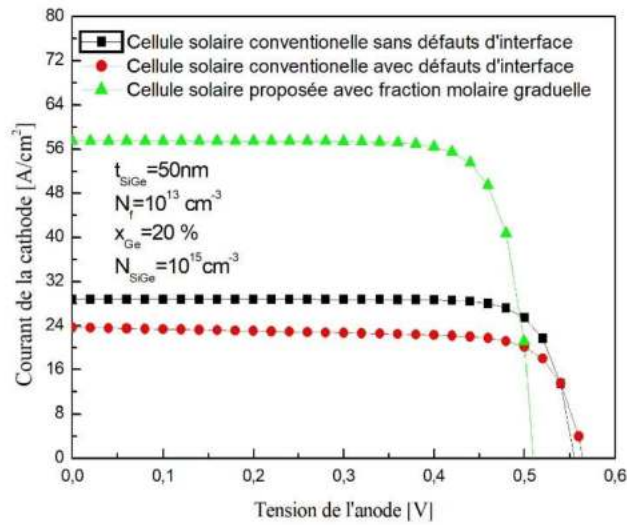


Figure III.7 : Caractéristiques I-V de la structure solaire à hétérojonction à base de SiGe/Si avec et sans défauts d'interface comparée à la structure proposée avec la fraction molaire graduelle en Ge (sans défauts d'interface) avec $t_{\text{SiGe}}=50\text{nm}$, $N_{\text{SiGe}}=4.10^{16}\text{cm}^{-3}$, $N_f=10^{13}\text{cm}^{-3}$ and $x_{\text{SiGe}}=20\%$.

La figure III.7 affiche le résultat des courbes courant-tension (I-V) de chacune des deux structures, la structure conventionnelle incluant les défauts de dégradation liée aux dislocations et la structure proposée.

D'après les résultats, on remarque que la structure conventionnelle présente une baisse de la valeur du courant généré, suite à la présence des pièges, par contre, la conception proposée offre la possibilité d'éviter les effets de dégradation liés aux dislocations, ce qui lui permet de fournir un courant de court-circuit beaucoup plus élevé que la cellule solaire conventionnelle à base de SiGe/Si, d'où la valeur de la fraction molaire de Ge est uniforme ($x_{\text{Ge}} = 0,2$). Ce comportement peut être expliqué par la présence de certains mécanismes :

- d'une part, l'augmentation progressive de la fraction molaire de Ge en même temps que l'épaisseur de la couche de SiGe, qui réduit l'inégalité des paramètres de maille, qui peut à son tour supprimer les pièges à l'interface Si/SiGe.

- Et d'autre part, l'aspect de la fraction molaire de Ge peut être bénéfique au niveau de l'absorption des cellules solaires, où l'augmentation progressive du Ge suggère la modulation de la bande interdite, conduisant ainsi à améliorer amplement la génération d'électrons/trous.

Afin d'évaluer parfaitement la cellule solaire étudiée selon la performance électrique, nous analysons l'impact du profil de la fraction molaire de Ge sur le comportement électrique des cellules solaires.

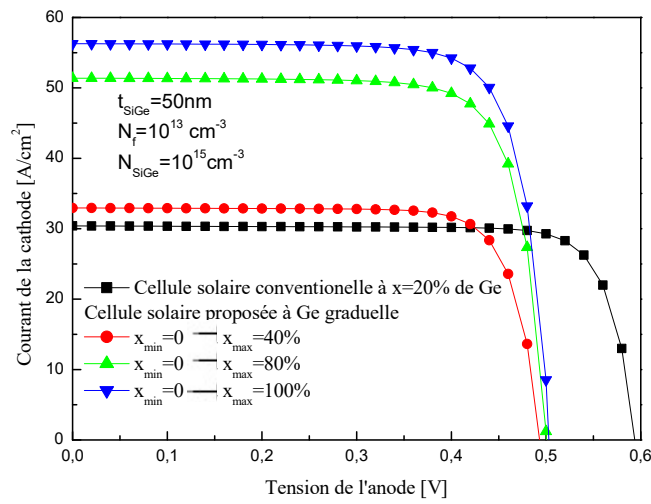


Figure III.8 : Caractéristiques I-V de la cellule solaire à base de SiGe/Si avec et sans défauts d'interface comparée à la conception proposée associée aux différents profils de la fraction molaire du Ge, avec $t_{\text{SiGe}}=50\text{nm}$, $N_{\text{SiGe}}=10^{15}\text{cm}^{-3}$ et $x_{\text{SiGe}}=20\%$.

Grace aux résultats obtenus sur la figure III.8, la courbe courant-tension (I-V) de la conception proposée dont la teneur en Ge varie entre $x_{\text{min}} = 0$ et $x_{\text{max}} = 1$, fournit un remarquable photo-courant, par rapport aux autres conceptions proposées des différentes valeurs du profil de la fraction molaire de Ge. Ce comportement peut être attribué à l'augmentation de l'absorption tout au long du spectre de lumière, particulièrement au niveau de la région du proche-infrarouge, en augmentant la teneur en Ge dans la couche de SiGe.

De plus, la conception proposée présente une amélioration au niveau du facteur de forme par rapport à la conception conventionnelle à base de SiGe/Si, ce qui peut s'expliquer par l'aspect technique de la bande interdite offerte par la structure proposée. Ce phénomène suggère la modulation de la résistance totale des cellules solaires. Cependant, on peut voir

d'après la figure III.8 que l'augmentation de la fraction molaire de Ge, diminue la tension de circuit-ouvert, ce qui est principalement dû au rétrécissement de la bande interdite, induit par l'augmentation de la teneur en Ge optée dans la structure proposée.

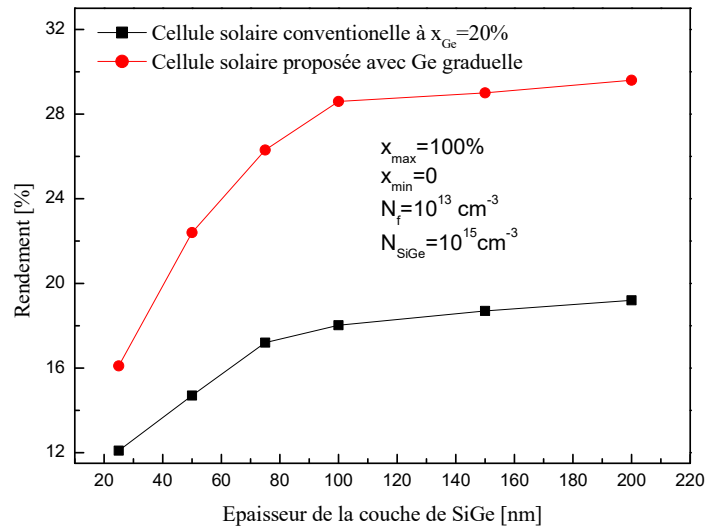


Figure III.9 : Rendement de conversion des deux cellules solaires basées sur le SiGe/Si avec la fraction molaire de Ge graduelle et la conception conventionnelle en fonction de l'épaisseur de la couche du SiGe avec $x_{\min}=0$, $x_{\max}=100\%$, $N_{\text{SiGe}}=10^{15}\text{cm}^{-3}$ et $N_{\text{p-Si}}=5.10^{17}\text{cm}^{-3}$.

Pour l'exhaustivité de ce travail, il semble utile d'élucider l'impact de l'épaisseur de la couche de SiGe proposée avec la fraction molaire de Ge graduelle sur le rendement de la photo-conversion des cellules solaires. Pour ce faire, la figure III.9 présente les résultats obtenus des courbes du rendement des deux cellules solaires ; la conception proposée et la structure conventionnelle à base de SiGe/Si.

Il est clairement démontré qu'à partir des résultats de la figure III.9, l'augmentation de l'épaisseur de la couche de SiGe, le rendement de conversion des cellules solaires augmente pour la structure conventionnelle autant que pour la structure proposée. De plus, on peut voir que le rendement fourni par la conception proposée présente une bonne sensibilité d'où une rapidité à l'augmentation, par rapport à la structure conventionnelle. Ce phénomène peut être attribué au fait qu'une forte épaisseur implique une amélioration de l'absorbance et donc un courant de court-circuit accru.

Mais il faut noter qu'à une certaine épaisseur de la couche de SiGe ($t_{\text{SiGe}} = 100 \text{ nm}$), le rendement de la cellule solaire est saturé ; suite aux effets de recombinaison résultant de l'augmentation de l'épaisseur de la couche de SiGe, d'où elle impose un taux de recombinaison plus élevé dans la couche de SiGe, qui est principalement lié à la longueur de diffusion du porteur.

Il est important de noter que la possibilité d'augmenter l'épaisseur de SiGe n'est pas réalisable avec la méthode de la fraction molaire uniforme en Ge, due à la haute densité de défauts à l'interface SiGe/Si. En revanche, l'approche proposée de la fraction molaire de Ge graduée, offre l'opportunité d'utiliser d'épaisses couches de SiGe sans défauts à l'interface, ce qui permet d'atteindre d'excellents rendements.

Afin d'avoir une idée sur l'étude qualitative des performances de la cellule solaire proposée, les valeurs métriques de la structure solaire proposée, ainsi que la structure conventionnelle de la cellule solaire à base de SiGe sont illustrées sur le Tableau III.4.

Il est clairement démontré que la conception proposée offre plusieurs avantages, dont une augmentation du rendement de photo-conversion à 28,2%, le facteur de forme est également amélioré à 80,5%, le photo-courant délivré est de 62 mA/cm², ce qui produit 98% d'amélioration relative, par rapport à la cellule solaire conventionnelle à base de Si/SiGe [79].

Ces améliorations sont attribuées à la modulation de la bande interdite, suggérée par l'adoption de l'aspect graduelle de la fraction molaire, qui peut en fait moduler la résistance totale de la cellule solaire étudiée, afin d'obtenir une faible résistance série.

En fin de compte, notre étude révèle que l'approche fondée sur la fraction molaire graduée en Ge, agit sur l'amélioration de la performance des cellules solaires à base de SiGe/Si, permettant non seulement de supprimer efficacement les effets de dégradation liés aux dislocations, mais aussi agréant à plus de diffusion de la lumière, qui peut à son tour améliorer le comportement d'absorption des cellules solaires à base de Si / SiGe.

Tableau III.4 : Comparaison globale des performances des cellules solaires à base de SiGe/Si entre la conception conventionnelle et la conception proposée, y compris l'aspect de la fraction molaire graduelle.

Symbole	Résultats expérimentaux de la cellule conventionnelle à SiGe [56].	Cellule solaire proposée à base de SiGe avec fraction molaire graduelle en Ge.
Variable de la conception :		
Si (n+) épaisseur de la région t_{n-Si} (nm)	5	5
SiGe (n) épaisseur de la région t_{SiGe} (nm)	100	100
Si (P) épaisseur de la région t_{P-Si} (nm)	100	100
Si (P+) épaisseur de la région t_{P+-Si} (nm)	200	200
Si (n+) dopage de la région N_{n-Si} (cm^{-3})	N type 5×10^{17}	N type 5×10^{17}
SiGe (n) dopage de la région N_{SiGe} (cm^{-3})	P type 10^{15}	P type 10^{15}
Si (P) dopage de la région N_{P-Si} (cm^{-3})	P type 8×10^{15}	P type 8×10^{15}
Si (P+) dopage de la région N_{P+-Si} (cm^{-3})	P type 5×10^{18}	P type 5×10^{18}
Défauts d'interface N_f (cm^{-3})	5×10^{12}	-
Fraction molaire de Ge x_{Ge} (%)	20	-
Maximum de la fraction molaire de Ge x_{max} (%)	-	100
Minimum de la fraction molaire de Ge x_{min} (%)	-	0
Paramètres de performance :		
Courant de court-circuit (mA/cm^2)	28	62
Tension circuit-ouvert (mV)	68	50
Facteur de forme (%)	74	80.5
Rendement (%)	16.4	28.2

III.4. Conclusion

Après avoir effectué un travail approfondi dans la première partie du chapitre, portant sur une étude numérique complète et efficace sur le plan de modélisation numérique de l'immunité de la cellule solaire Si_{1-x}Ge_x/Si contre l'effet de la dégradation au niveau de l'échelle nanométrique. Les modèles numériques ont été utilisés pour prédire les performances et l'immunité du dispositif contre les effets des défauts d'interface, où le comportement des caractéristiques de la cellule solaire montre que la cellule solaire Si_{1-x}Ge_x/Si présente une dégradation de la performance électrique due aux effets des défauts d'interface. Par conséquent, des efforts visant à réduire l'effet de ce type de défauts sont entrepris, afin d'améliorer la fiabilité de la cellule solaire. Dans ce contexte, une nouvelle approche de conception basée sur les algorithmes génétique (GA) afin d'optimiser les

performances électriques des cellules solaires $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ pour des applications photovoltaïques ultra-minces a été proposée.

Dans la seconde partie du chapitre, une nouvelle vision de la cellule solaire à hétérojonction à base de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ utilisant un aspect de fraction molaire de Ge graduelle est proposée afin d'améliorer la fiabilité de la cellule solaire contre les défauts d'interface. L'analyse indique que la structure adoptée améliore le comportement optique comme un modulateur de bande interdite optique qui conduit à améliorer le comportement d'absorption des cellules solaires. De plus, l'approche proposée suggère la possibilité de surmonter le problème des effets de dislocation liés à la dégradation en adaptant progressivement le désaccord du réseau à l'interface Si/SiGe. De plus, l'impact des paramètres de conception de la couche de SiGe proposé, tels que : l'épaisseur de la couche et le profil de la fraction molaire de Ge suggéré, sur les propriétés des cellules solaires sont également réalisés. On a constaté que les caractéristiques des cellules solaires à base de SiGe/Si sont significativement améliorées par rapport à la conception conventionnelle. Il a également été révélé que la conception proposée ouvre la voie à la modulation de la bande interdite optique, ce qui permet d'améliorer à la fois le courant de court-circuit et le facteur de forme des cellules solaires. Par conséquent, la conception proposée s'ouvre sur de nouvelles opportunités pour éviter les pertes de recombinaison en supprimant les défauts d'interface entre SiGe/Si, ce qui est en fait une alternative potentielle pour fournir des cellules solaires à hétérojonction SiGe/Si à haut rendement.

Chapitre IV

Optimisation des performances optiques des cellules solaires à hétérojonctions

IV.1. Introduction.....	65
IV.2. Effet plasmon des nanoparticules.....	66
IV.2.1. Le milieu environnant.....	68
IV.2.2. La nature des nanoparticules.....	68
IV.2.3. La forme et la taille des nanoparticules	69
IV.2.4. La densité des nanoparticules	69
IV. 3. Modélisation numérique.....	70
IV.4. Résultats et discussions.....	73
IV.4.1. Optimisation de la performance optique des cellules solaires à hétérojonction à base de ZnO / p-Si	76
IV.5. Conclusion	80

IV.1. Introduction

Les cellules solaires à base de silicium cristallin ont permis une croissance énorme du rendement de photo-conversion, malgré un coût de fabrication légèrement élevé [78-79, 82, 87-88]. Pour une performance photovoltaïque distincte, une amélioration du rapport rendement/coût doit être obtenue. Comme les cellules solaires à couche mince à base de silicium amorphe hydrogéné constituent une alternative viable en raison de leurs faibles coûts avec un rendement de photo-conversion acceptable. Malheureusement pour la croissance parfaite du silicium amorphe, le dépôt assisté par plasma est nécessaire, ce qui peut compliquer le processus de fabrication [88-90]. Dans cette optique, la conception holistique de structures de cellules solaires à faible coût avec une compréhension approfondie des propriétés optiques des matériaux, conduit la performance photovoltaïque à des niveaux sans précédent. A cet effet, l'utilisation de bicouche basée sur des matériaux à large bande interdite tels que l'oxyde de zinc (ZnO) et l'oxyde de zinc dopé à l'aluminium (AZO) avec une haute conductivité, développée sur la couche absorbante p-Si pourrait améliorer le rapport rendement/coût [91, 92].

Fondamentalement, le dépôt direct à basse température de la couche ZnO sur la couche absorbante c-Si constitue le principal avantage de cette structure alternative [91-94]. Cet avantage permet de réduire les coûts de fabrication par rapport aux technologies de cellules solaires c-Si et à couches minces. Par ailleurs, la bicouche ZnO/AZO offre la possibilité de doubles fonctionnalités, où elle réagit comme un TCO, et en même temps tel qu'un émetteur de cellules solaires avec un contact ohmique parfait. Malgré la rentabilité de la cellule solaire à base de n-ZnO/p-Si, le faible rendement d'absorbance représente le problème le plus important à résoudre pour obtenir d'excellentes performances photovoltaïques.

Dans cette perspective, plusieurs travaux récents se sont concentrés sur l'amélioration du rendement de photo-conversion des cellules solaires à base de n-ZnO/p-Si en proposant des conceptions innovantes [93-95]. Cependant, l'incapacité d'améliorer fortement le comportement d'absorption des cellules solaires, en particulier dans les régions de la lumière visible et la lumière proche-infrarouge, persiste, ce qui conduit à réduire son rendement électrique. À cet égard, il est très important de développer de nouvelles méthodologies de conception pour achever l'amélioration souhaitée concernant la performance optique des cellules solaires. A notre connaissance, aucune étude n'a été effectuée pour améliorer les performances optiques du n-ZnO/p-Si en introduisant à la fois des paradigmes de texturisation d'interface et d'incorporation de nanoparticules métalliques d'argent (Ag). Dans ce cadre, nous proposons une nouvelle approche basée sur la gravure de l'interface n-ZnO/p-Si et l'intégration des nanoparticules métalliques pour l'amélioration de la capacité de piégeage de la lumière.

Les avantages de l'utilisation des nanoparticules d'argent et la gravure de l'interface ZnO/p-Si est d'améliorer les performances photovoltaïques de la cellule solaire.

On trouve que la structure proposée assure une double fonctions : l'amélioration de la diffusion de la lumière dans la couche absorbante du Si et l'amélioration de l'absorption dans la couche mince du ZnO à travers le spectre électromagnétique. De plus, l'approche basée sur l'optimisation par essaim de particules (PSO) (voir annexe B) est exploitée afin d'optimiser géométriquement la conception proposée en vue d'atteindre l'objectif de la performance optique.

Les résultats obtenus indiquent que la cellule solaire à hétérojonction n-ZnO/p-Si optimisée offre un rendement de photo-conversion élevé et à faible coût, ce qui la rend plus adaptée à l'application photovoltaïque.

IV.2. Effet plasmon des nanoparticules

La spécificité des matériaux métalliques est que leurs électrons de conduction sont faiblement liés au noyau des atomes. Ces électrons peuvent se déplacer facilement autour de leur position d'équilibre et être aisément excités sous l'effet d'une onde électromagnétique. La réponse optique d'un matériau sous l'effet d'un champ électromagnétique incident est décrite par sa permittivité relative. De plus dans le cas des nanoparticules leurs tailles deviennent comparables à la longueur d'onde électromagnétique. En conséquence, l'ensemble des électrons conducteurs des nanoparticules interagit avec le champ électromagnétique incident, ce nuage électronique (ou plasma) peut se retrouver délocalisé, et il en résulte une distribution de charges non uniforme dans le métal. Cette non-uniformité induit la création d'un champ électrique qui exerce une force de rappel sur le gaz d'électrons délocalisé, qu'il tente de le ramener à l'équilibre. Il en découle alors une oscillation collective des électrons libres autour de la position d'équilibre, et c'est cette oscillation du plasma qui est désignée sous le terme de plasmon. Les plasmons sont les quasi-particules élémentaires de la plasmonique.

Pour trouver la fréquence de résonance des plasmons de volume, soit la fréquence d'oscillation collective des charges électrique, on introduit tout d'abord la fréquence plasmonique ω_p [108] :

$$\omega_p = \sqrt{\frac{Nq^2}{\epsilon_0 m_0}} \quad \text{IV.1}$$

Avec:

m_0 : La masse effective d'un électron de conduction.

ε_0 : La constante diélectrique du vide.

N : La densité volumique d'électron.

q : La charge d'électron.

Généralement on utilise cette fréquence pour calculer la valeur de la permittivité ε_m :

$$\varepsilon_m(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - i\omega\gamma} \quad \text{IV.2}$$

γ est la constante de relaxation, si on prend ε_1 la partie réelle de la permittivité et ε_2 la partie imaginaire on aura [108] :

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad \text{IV.3}$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{\omega_p^2\gamma}{\omega^3} \quad \text{IV.4}$$

En considérant que les nanoparticules sont très inférieures de taille de la longueur d'onde incidente, on peut appliquer le modèle de Mie qui consiste à résoudre les équations de Maxwell. La résolution des équations nous donne le coefficient d'extinction de Mie qui est exprimé par l'expression suivante [108] :

$$K(\omega) = \frac{9N\omega V\varepsilon_d(\omega)^{3/2}}{c} \frac{\varepsilon_2(\omega)}{[\varepsilon_1(\omega) + 2\varepsilon_d(\omega)]^2 + \varepsilon_2(\omega)^2} \quad \text{IV.5}$$

Avec :

V : Le volume de la nano bille.

c : La célérité de la lumière dans le vide.

ε_d : La permittivité complexe du milieu diélectrique environnant.

Le coefficient d'extinction $k(\omega)$ est la valeur de la perte d'énergie d'un rayonnement électromagnétique, il est donc équivalent à un coefficient d'absorption et peut être considéré comme la part de l'énergie incidente, d'après l'équation précédente la valeur maximale de $k(\omega)$ est obtenue lorsque [108] :

$$[\varepsilon_1(\omega) + 2\varepsilon_d(\omega)]^2 + \varepsilon_2(\omega)^2 = 0 \quad \text{IV.6}$$

D'où :

$$|\varepsilon_1(\omega)| \gg \varepsilon_2(\omega)$$

La condition de résonance devient [108] :

$$\varepsilon_1(\omega) = -2\varepsilon_d(\omega) \quad \text{IV.7}$$

On déduit donc théoriquement la fréquence maximale de l'onde de surface ω_s , qui peut se propager le long d'une interface « métal/vide » qui est [108] :

$$\omega_s = \frac{\omega_p}{\sqrt{1+2\varepsilon_d}} \quad \text{IV.8}$$

La résonance du plasmon est sensible à l'environnement diélectrique et à la géométrie de la nanoparticule, ceci permet de dégager les paramètres les plus cités dans la littérature [101] (figure IV.1) :

IV.2.1. Le milieu environnant

Les interactions à l'origine des résonances plasmoniques ont principalement lieu au voisinage de l'interface entre la particule et le milieu environnant. L'augmentation de l'indice de réfraction du milieu environnant provoque un décalage vers le rouge de la longueur d'onde de résonance. Ce décalage du pic de résonance est prédit par la théorie de Mie comme étant linéaire, ce qui a bien été vérifié expérimentalement par ailleurs [103- 106]. Le décalage spectral du pic de résonance peut s'expliquer de la façon suivante : à la résonance, la forte exaltation du champ électrique qui prend place au voisinage de la particule induit une polarisation du milieu environnant dans ces mêmes régions. Cette dernière va venir compenser la polarisation de la nanoparticule métallique supportant la résonance, avec pour conséquence une décroissance de la densité de charges à la surface de celle-ci. Dès lors, la force de rappel qui s'exerce est moindre, et ceci se traduit par un décalage de la fréquence de résonance vers le rouge [105].

IV.2.2. La nature des nanoparticules

Le choix du métal est également un point important car les changements de constantes diélectriques d'un métal à l'autre vont induire des modifications de la condition de résonance pour une même taille et une même forme de nanoparticule. De nombreux métaux tels que Pd, Pt, Al, Au, Ag présentent des résonances plasmoniques. Toutefois, l'or et l'argent sont les métaux les plus choisis car ils présentent des résonances plasmoniques très intenses dans la gamme spectrale du visible. De plus, pour la nanoparticule d'Ag, le pic d'extinction est plus de deux fois plus grand que celui de l'Au, avec une contribution de la diffusion presque totale pour ce diamètre (alors que dans le cas de l'Au, c'est l'absorption qui contribue majoritairement au pic d'extinction). Pour des applications basées sur le photovoltaïque, on cherchera à obtenir une section efficace de diffusion bien supérieure à celle d'absorption. De ce fait, l'utilisation de l'Ag, qui est plus efficace en terme de diffusion [108], sera privilégiée dans notre étude.

IV.2.3. La forme et la taille des nanoparticules

Quand la symétrie d'une nanoparticule se réduit, la distribution de la charge sur la surface peut se traduire non seulement par des modes dipolaires avec des fréquences de résonances différentes, mais aussi par des modes multipolaires d'ordre supérieur. Par exemple : sur la figure IV.1 une nanoparticule sphéroïdale présente trois résonances plasmoniques, une pour chaque axe, et le spectre d'extinction présente alors trois maxima distincts correspondant à chacune des résonances plasmoniques. La résonance plasmonique dont la longueur d'onde est la plus faible correspond à l'axe le plus court de la nanoparticule alors que la résonance plasmonique de longueur d'onde la plus grande correspond à l'axe le plus grand. De plus, lorsque la dimension d'un axe diminue par rapport aux autres, on observe alors un décalage vers le bleu de sa résonance plasmonique. À l'inverse, l'augmentation de la dimension d'un des axes induit le décalage vers le rouge de la résonance plasmonique.

Lorsque la taille des nanoparticules est beaucoup plus petite que la longueur d'onde incidente, seule l'oscillation dipolaire contribue à la section d'extinction puisque les électrons vibrent de façon cohérente avec la lumière [91]. Cependant, pour des nanoparticules plus grandes, l'approximation dipolaire devient invalide car la lumière ne peut plus polariser les nanoparticules de façon homogène, par conséquent, la taille de la nanoparticule est un troisième paramètre clé qui gouverne la condition de résonance.

IV.2.4. La densité des nanoparticules

Un dernier paramètre géométrique va influencer la position de la résonance plasmonique. Si l'écart entre les nanoparticules est très faible par rapport à la longueur d'onde incidente, leurs champs électriques induits par leurs plasmons de surface peuvent se coupler, conduisant dès lors à une modification de la résonance totale. De ce fait, une diminution de l'écart entre les nanoparticules conduit à un décalage de la résonance plasmonique vers le rouge pour un champ incident polarisé le long de l'axe de couplage, tandis qu'un décalage vers le bleu est observé pour une polarisation perpendiculaire [107].

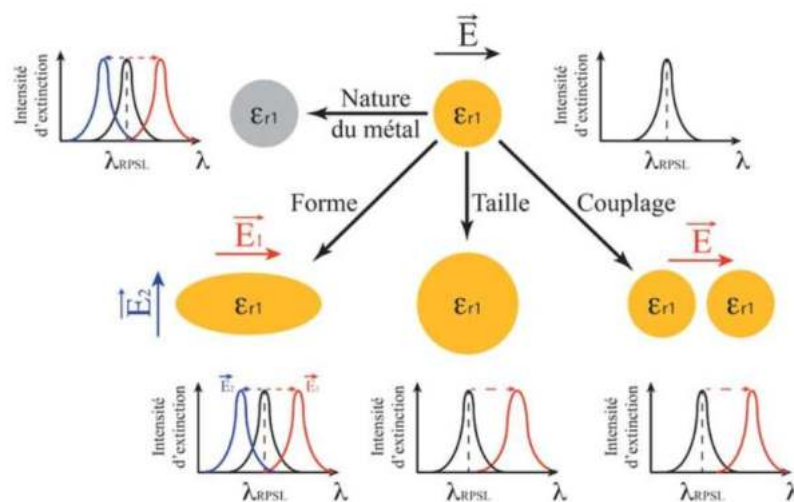


Figure IV.1 : Principaux paramètres influençant la position de la RPSL [102].

IV. 3. Modélisation numérique

L'idée clé de la cellule solaire basée sur n-ZnO/p-Si réside principalement dans l'utilisation de matériaux bicouches à larges bandes, tels que l'oxyde de zinc (ZnO) et l'oxyde de zinc dopé à l'aluminium (AZO) développés sur la couche absorbante p-Si. Dans la conception proposée, des modifications de conception polyvalentes sont adoptées afin d'améliorer le comportement optique des cellules solaires à base de n-ZnO/p-Si.

1°) L'intervention au niveau de la conception est faite au niveau de l'interface ZnO/p-Si, en supposant que la morphologie de la couche de c-Si est texturée cristallographiquement avec des gravures, où w et h sont la largeur et la hauteur.

2°) En proposant d'introduire des nanoparticules métalliques d'Ag à l'intérieur de la couche de ZnO dans le but d'améliorer la performance optique des cellules solaires.

Dans ce contexte, la figure IV.2 illustre des schémas à la fois de la cellule solaire conventionnelle à base de n-ZnO/p-Si et de la conception proposée incluant les deux suggestions en même temps : l'incorporation des nanoparticules métalliques et la texturisation de l'interface avec gravure. Pour notre modélisation numérique ; les épaisseurs de chacune des couches p-Si, ZnO et AZO sont désignées respectivement comme suit : t_{si} , t_z et t_a , tandis que le rayon et la position des nanoparticules sont définis en R et P .

Les modifications de conception proposées sur la cellule solaire à base de n-ZnO/p-Si entraînent de nombreuses difficultés mathématiques pour une modélisation analytique éventuelle, dont elles sont associées à la complexité structurale qui peut brouiller la solution analytique des équations d'absorbance.

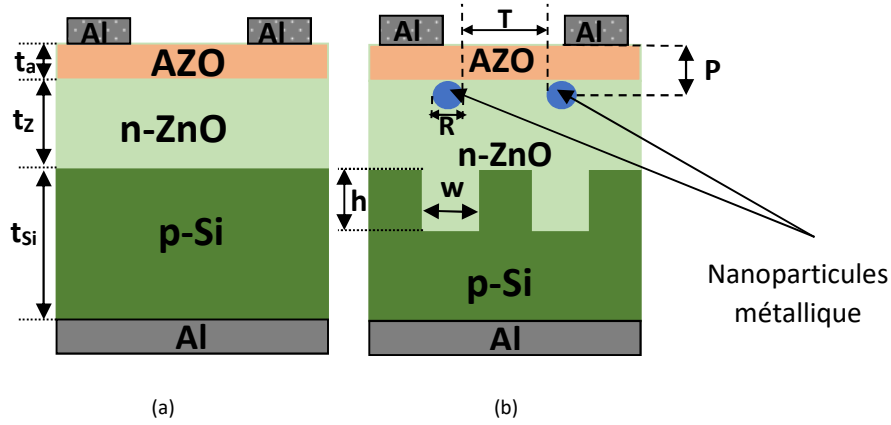


Figure IV.2 : Coupe transversale des cellules solaires à hétérojonction à base de n-ZnO/p-Si :
 a) structure conventionnelle, b) conception proposée avec texturation d'interface en même temps que l'adjonction des nanoparticules d'Ag.

De plus, pour la modélisation précise de la conception proposée, on ne peut ignorer à la fois les effets de diffraction et les effets plasmoniques qui conduisent à un point de modélisation limitant les performances principalement liés à la précision de détermination des équations de Maxwell. Ainsi, en conséquence de ces équations, nous pouvons déduire les équations de Helmholtz comme suit :

$$\nabla^2 E + \mu \varepsilon \omega^2 E = 0 \quad \text{IV.9(a)}$$

$$\nabla^2 H + \mu \varepsilon \omega^2 H = 0 \quad \text{IV.9(b)}$$

où :

E et H sont les intensités du champ électrique et du champ magnétique ;

μ est la perméabilité et ε représente la permittivité du matériau.

Dans notre cas on suppose que l'onde incidente est dans le mode du champ électrique transversal, seul le champ électrique dans la direction z doit être estimé. Par conséquent, l'équation de Helmholtz peut être réduite à :

$$\nabla^2 E + \mu \varepsilon \omega^2 E = 0 \quad \text{IV.10}$$

L'absorbance de la structure peut être définie comme le rapport entre la puissance dissipée et la puissance incidente. Par conséquent, en intégrant le vecteur de Poynting par rapport à la surface de la structure, nous pouvons estimer la puissance incidente à la surface de la structure.

Considérant que, la puissance absorbée peut être calculée en intégrant le vecteur de Poynting dans le volume du matériau, dont il décrit la puissance dissipée dans la même couche.

De ce fait, les vecteurs de Poynting et de la densité absorbée de puissance peuvent être exprimés comme suit [95] :

$$P_{abs} = \frac{1}{2} |\overline{E}_z(\vec{r})|^2 \sigma \quad \text{IV.11}$$

$$P_{poynting} = \frac{1}{2} \text{Re}\{ \overline{E}_z(\vec{r}) \times \overline{H}^*(\vec{r}) \} \quad \text{IV.12}$$

Ou :

σ représente la conductivité de la couche mince déduite de la formule suivante :

$$\sigma = \omega \varepsilon_0 \varepsilon''(\lambda) \quad \text{IV.13}$$

ε'' représente la partie imaginaire de la constante diélectrique du matériau complexe et ε_0 fait référence à la permittivité du vide.

$\overline{E}_z(\vec{r})$ désigne la composante verticale des champs électriques.

H^* le conjugué du champ magnétique complexe.

$\text{Re}\{ \overline{E}_z(\vec{r}) \times \overline{H}^*(\vec{r}) \}$ représente la partie réelle du vecteur résultant du produit vectoriel des deux composantes électrique et magnétiques de l'onde.

Dans ce cadre, les techniques numériques peuvent traiter les problèmes cruciaux susmentionnés et offrent la possibilité de modéliser efficacement le comportement optique de la structure proposée. A cet effet, la discrétisation des équations de Maxwell en utilisant la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD : Finite Difference Time Domain) (voir annexe C) fournie par le simulateur du dispositif ATLAS-2D en utilisant le module LUMINEUX 2-D [96], totalement efficace pour modéliser parfaitement le comportement optique des cellules solaires proposées, incorporant ainsi l'impact des deux interventions : Texturisation et nano particules d'Ag. De plus les matériaux (AZO, c-Si et ZnO) et les constantes optiques (n , K) utilisées dans la modélisation numérique dépendent de la longueur d'onde et sont extrais de la base de données SOPRA.

Pour la procédure de modélisation, on suppose qu'une onde plane transportée a une incidence normale à la surface AZO. Aussi, la périodicité est exprimée par l'établissement des conditions aux limites périodiques. De plus, les détails concernant la méthodologie de calcul de l'estimation des paramètres optiques du dispositif, à savoir la réflectance totale et l'absorbance moyenne sont fournis dans [97], [98]. Ainsi, les formulations finales de l'absorbance moyenne et de la réflectance peuvent être données dans les équations suivantes [97, 98] :

$$A(\lambda) = \frac{\int_V \frac{1}{2} |\vec{E}_Z(\vec{r})|^2 \omega \epsilon_0 \epsilon''(\lambda) dV}{\int_S \frac{1}{2} \text{Re}\{\vec{E}_Z(\vec{r}) \times \vec{H}^*(\vec{r})\} dS} \quad \text{IV.14}$$

$$R(\lambda) = \frac{\int_{\text{port1}} (E_c - E_1) E_1^* dA_1}{\int_{\text{port1}} (E_1 E_1^*) dA_1} = \frac{\text{puissance réfléchi}}{\text{puissance incidente}} \quad \text{IV.15}$$

Où :

E_c représente le champ électrique calculé sur le port, qui se repose sur l'excitation ajoutée au champ réfléchi et E_1 désigne le champ électrique sur le port 1.

Afin d'approfondir la notion du rendement de photo-conversion des cellules solaires, il est important d'estimer le rendement d'absorption totale (TAE : Total Absorbance Efficiency) exprimé comme suit :

$$TAE = \frac{\int_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} \frac{\lambda}{hc} A(\lambda) I(\lambda) d\lambda}{\int_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} \frac{\lambda}{hc} I(\lambda) d\lambda} \quad \text{IV.16}$$

IV.4. Résultats et discussions

Afin d'avoir un aperçu détaillé de l'impact de l'existence des gravures à l'interface et de l'incorporation des nanoparticules d'argent, sur l'amélioration de la performance photovoltaïque des cellules solaires à hétérojonction à base de ZnO/p-Si, il est crucial de dévoiler les spectres d'absorbance de la structure proposée.

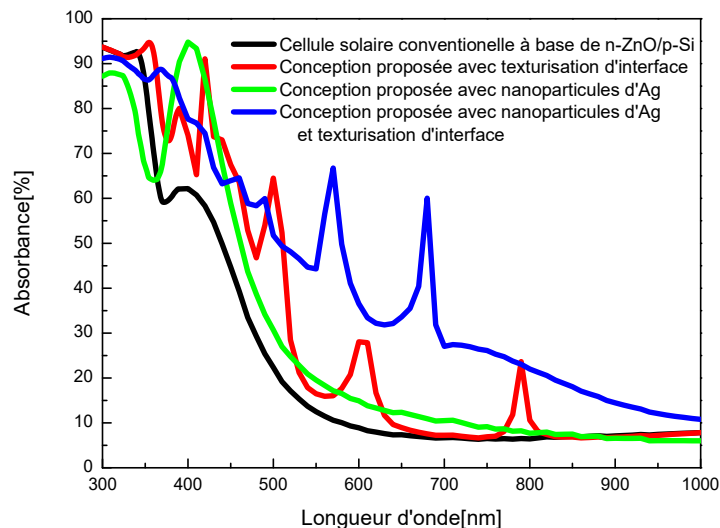


Figure IV.3 : Courbes d'absorbance en fonction de la longueur d'onde sur tout l'étendue de l'ensemble du spectre électromagnétique ; pour la conception conventionnelle, auprès des conceptions incluant la texturation d'interface et les nanoparticules d'Ag, avec $h = 100$ nm, $w = 100$ nm, $R = 20$ nm et $P = 100$ nm.

Dans cette perspective, la figure IV.3 compare les courbes du spectre d'absorption de la cellule solaire conventionnelle à hétérojonction à base de ZnO/p-Si avec ceux de la structure proposée, sur la base de différentes interventions au niveau de la conception.

Il apparaît clairement que la réponse des spectres présente une amélioration au niveau du comportement d'absorbance grâce à l'incorporation à la fois des gravures à l'interface et à l'adjonction des nanoparticules d'Ag, par rapport à la réponse offerte par la cellule solaire conventionnelle à base de n-ZnO/p-Si. De plus, la conception proposée avec texturation d'interface présente un rendement d'absorption total (TAE) supérieur à celui fourni par la cellule solaire à base de ZnO/p-Si avec des nanoparticules d'Ag. En outre, on peut également remarquer à partir de cette figure que certains pics d'absorption sont apparus dans les plages du visible et du proche-infrarouge. Ces pics peuvent être attribués à l'effet d'interférence de couches minces, produites par la propagation d'ondes cohérentes imposées par l'interface ZnO/c-Si texturée.

Dans cette mesure, l'interface comprenant des gravures, permet d'obtenir une excellente capacité de piégeage de la lumière conduisant à faciliter la diffusion de la lumière à l'intérieur de la couche absorbante. De même, les nanoparticules d'Ag introduites dans le matériau n-ZnO produisent l'effet de résonance plasmatique de surface localisé qui peut, à son tour, améliorer les performances optiques des cellules solaires. Par conséquent, les modifications de conception proposées ont une importante implication dans la modulation du comportement optique de la cellule solaire à base de ZnO/p-Si.

La figure IV.4 illustre la distribution du champ électrique au niveau de la conception conventionnelle et des conceptions proposées, y compris l'impact de la texturisation de l'interface et des paradigmes de nanoparticules métalliques pour la valeur de longueur d'onde de 500nm. à partir de cette figure Il est évident de déduire que des changements significatifs dans le profil du champ électrique peuvent être obtenus en introduisant les améliorations proposées. De plus, les modifications de conception adoptées engendrent de fortes intensités de champs électriques principalement confinés dans la région de l'absorbeur de Si conduisant à améliorer le TAE des cellules solaires. Dans cette mesure, la conception proposée offre des possibilités plus larges pour obtenir une excellente capacité de piégeage de la lumière, et pour moduler le comportement du champ électrique dans la région du Si qui joue le rôle de l'absorbeur à travers l'effet de confinement optique. Ce phénomène permet d'atteindre des améliorations potentielles du comportement optique des cellules solaires, donc une amélioration du rendement de photo-conversion.

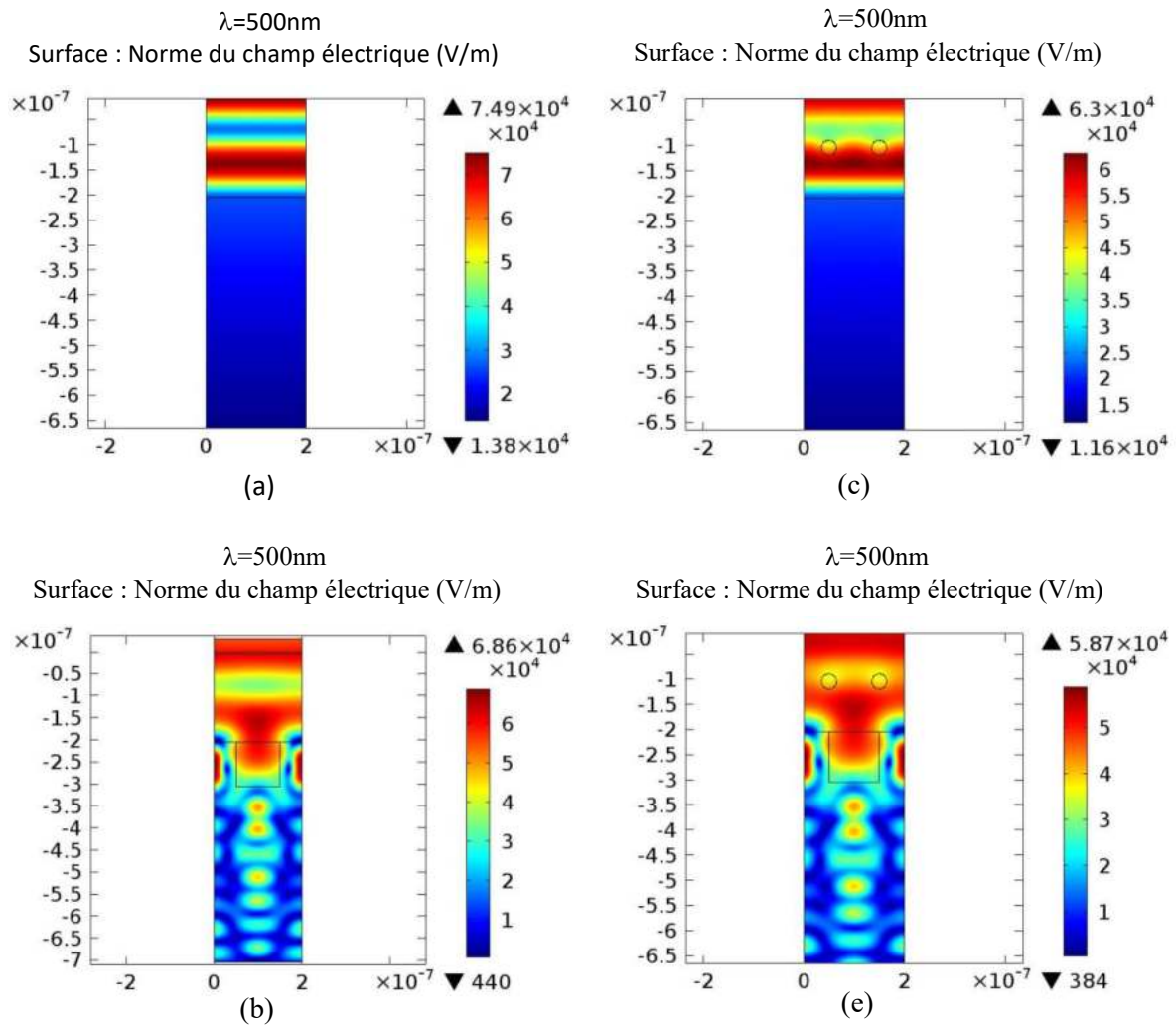


Figure IV.4 : Le profil du champ électrique de : (a) la conception conventionnelle comparé à celui de la conception proposée comprenant : (b) une texturation d'interface, (c) des nanoparticules d'Ag et (d) les deux en même temps, pour une longueur d'onde spécifique ($\lambda = 500\text{nm}$), avec $t_z=150\text{ nm}$, $t_a=20\text{ nm}$ et $t_{\text{Si}}=500\text{nm}$.

Les résultats obtenus indiquent que les paramètres géométriques de la conception proposés ont un impact important dans l'amélioration de la performance optique des cellules solaires à base de ZnO/p-Si. Dans cette perspective, l'utilité des modifications de conception proposées dépendent de la capacité à concevoir les gravures et à incorporer les nanoparticules métalliques afin d'augmenter la capacité de piégeage de la lumière. Dans ce cadre, l'ajustement soigneux des paramètres géométriques de la conception proposée telle que : la largeur et la hauteur des gravures ainsi que la position et le rayon des nanoparticules d'Ag peuvent être utiles dans l'amélioration du rendement total de l'absorbance. À cette fin, de nouvelles connaissances basées sur une approche d'optimisation globale peuvent être intuitivement efficaces pour

améliorer la caractéristique optique des cellules solaires qui constitue l'objectif principal de la sous-section suivante.

IV.4.1. Optimisation de la performance optique des cellules solaires à hétérojonction à base de ZnO / p-Si

L'optimisation géométrique de la cellule solaire à base de ZnO/p-Si proposée, comprenant à la fois une ingénierie d'interface et des nanoparticules métalliques, apparaît comme une solution primordiale pour augmenter le rendement de l'absorbance totale des cellules solaires. À cet égard, l'approche de l'optimisation par essaim de particules (PSO) semble être d'une aide précieuse pour l'enregistrement du comportement optique désiré de la structure étudiée. Dans cette perspective, l'approche PSO est un algorithme heuristique initié ces dernières années par Eberhart et Kennedy [99]. Fondamentalement, cet algorithme reproduit la métaphore du comportement social naturel du flocage des oiseaux. Notamment, l'approche basée sur PSO démontre une grande capacité à fournir la solution globale à des problèmes mathématiques très difficiles et complexes dans un vaste espace de recherche. De plus, cet algorithme heuristique a confirmé sa capacité à être implémenté pour résoudre divers problèmes d'optimisation associés aux champs d'ingénierie [97-100].

Principalement, l'approche basée sur le PSO suggère l'utilisation de techniques aléatoires pour minimiser une fonction de fitness bien définie qui permet d'atteindre la solution globale du problème d'optimisation. En outre, les particules candidates sont affectées par deux facteurs dans l'espace de recherche, à savoir la meilleure position de chaque particule dans l'essaim (P_{li}^k) et la meilleure position du groupe de particules (P_{gi}^k). À cet égard, afin d'ajuster et mettre à jour la position et la vitesse des particules, l'utilisation de la relation inspirée des modèles comportementaux du flocage des oiseaux est primordiale. Dans cette optique, la particule i^{th} qui comprend le vecteur de paramètres de conception géométrique de cellules solaires à base de ZnO/p-Si $X_i = (t_{AZO}, t_{c-Si}, R_{core}, R_{shell}, P, t_{a-Si:H})$, la position et la vitesse de chaque particule peuvent être calculés en utilisant les équations suivantes :

$$V_i^{k+1} = wV_i^k + c_1r_1^k(p_{li}^k - X_i^k) + c_2r_2^k(p_{gi}^k - X_i^k) \quad \text{IV.17(a)}$$

$$X_i^{k+1} = X_i^k + V_i^{k+1} \quad \text{IV.17(b)}$$

Avec : $i= 1 \dots n$

Où :

n se réfère à la taille de l'essaim, X_i^k et V_i^k indiquent respectivement la position et la vitesse de la particule, c_1 et c_2 sont les facteurs d'accélération cognitive et sociale, r_1 et r_2 dénotent les nombres aléatoires répartis dans la gamme de $[0,1]$ et X_i^k est la position réelle de la particule dans l'essaim.

Par conséquent, pour atteindre le rendement de photo-conversion la plus élevée possible, les paramètres géométriques de la cellule solaire proposée, y compris l'interface texturée et les nanoparticules d'Ag, seront optimisés en ce qui concerne les aspects suivants :

- Maximiser le rendement totale de l'absorbance
- Minimiser la réflexion totale

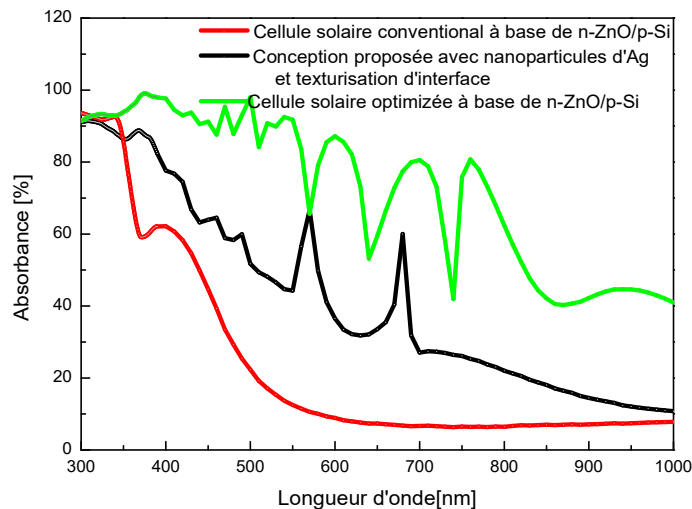
Dans cette perspective, la "méthode d'approche à somme pondérée" bien connue peut être exploitée pour formuler la fonction de fitness en incluant des coefficients de pondération. Ainsi, la fonction objectif pour l'optimisation géométrique peut être donnée par :

$$F(X_i) = w_1(1/R(\lambda)) + w_2 TAE$$

IV.18

Avec : $w_j(j=1,2)$ est le coefficient de pondération égal à $1/2$.

Pour le développement d'optimisation géométrique, on considère l'essaim de 30 particules, la génération de stalle du processus d'optimisation globale est égale à 500, quant à l'erreur est considérée comme infinitésimale avec l'aboutissement d'une stabilisation rapide de la fonction de fitness.



(a)

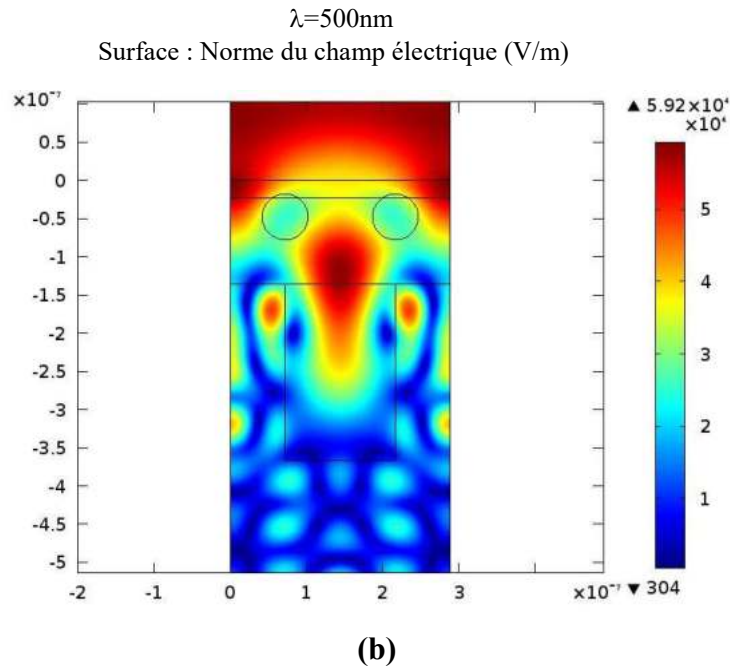


Figure IV.5 : (a) L'absorbance en fonction de la longueur d'onde pour la cellule solaire à base de n-ZnO/p-Si proposée incluant la texturation d'interface et les nanoparticules d'Ag avec et sans optimisation à l'égard de la conception conventionnelle.
(b) Répartition du champ électrique de la conception optimisée.

Comme prévu, après avoir effectué l'optimisation géométrique globale de la cellule solaire à base de ZnO/p-Si, y compris les modifications de conception adoptées, un comportement d'absorbance amélioré peut être obtenu comme il est révélé sur la figure IV.5 (a). De plus, la cellule solaire optimisée présente un TAE supérieur à celui offert par la contrepartie conventionnelle. Le comportement optique obtenu confirme le rendement de l'optimisation globale suggérée dans la sélection des paramètres géométriques appropriés pour lesquels une amélioration avantageuse de la diffusion de la lumière par rapport à la structure classique peut être atteinte. Plus important encore, le profil du champ électrique de la conception optimisée peut donner une idée approfondie du comportement optique obtenu. Dans ce contexte, la figure IV.5 (b) montre la répartition du champ électrique de la cellule solaire à base de ZnO/p-Si optimisée. Il est évident à partir de cette figure que la conception optimisée présente un comportement de champ électrique amélioré, où les intensités de champs électriques extrêmement denses à l'intérieur de la couche d'absorbeur de Si peuvent expliquer les caractéristiques d'absorbance améliorées.

Afin d'avoir une idée globale de la performance optique optimisée de la structure des cellules solaires, le Tableau IV.1 compare les mesures de performance obtenues à partir de notre conception optimisée avec celles de la cellule solaire à hétérojonction à base de ZnO/p-Si

conventionnelle. À partir de ce tableau, il est clairement démontré que la cellule solaire optimisée produit un rendement d'absorption totale de 43% de l'amélioration relative par rapport à la contrepartie conventionnelle. Par conséquent, les performances optiques et électriques globales des cellules photovoltaïques pour les applications photovoltaïques peuvent être consolidées en introduisant la conception optimisée.

Tableau IV.1 : Comparaison des performances optiques globales entre la cellule solaire conventionnelle à base de n-ZnO/p-Si et la conception proposée en tenant compte de la texturation de l'interface et en présence de nanoparticules d'Ag avec ou sans optimisation.

Symbol	Cellule solaire conventionnelle à base de n-ZnO/p-Si	Conception proposée avec traitement d'interface en comportant des nanoparticules d'Ag	Cellule solaire optimisée à base de n-ZnO/p-Si
Variables de la conception :			
Longueur d'onde λ (nm)	400	400	400
t_{c-Si} (nm) épaisseur de la couche p-c-Si	500	500	415
t_{ZnO} (nm) épaisseur de la couche ZnO	150	150	112
t_{AZO} (nm) épaisseur de la couche AZO	20	20	23
R (nm) rayon de la nanoparticule d'Ag	/	20	30
P(nm) position de la nanoparticule d'Ag	/	100	26
T(nm) période de la nanoparticule d'Ag	/	100	145
w(nm) largeur de la gravure	/	100	140
h(μ m) hauteur de la gravure	/	150	253
Paramètres de performance :			
Absorbance (%)	60	90	99
Réflexion (%)	0.31	0.05	0.00012
Rendement total de l'absorbance TAE (%)	19	42	75

En substance, il est évidemment confirmé que la cellule solaire à hétérojonction à base de ZnO/p-Si optimisée comprenant les caractéristiques proposées peut considérablement améliorer les caractéristiques optiques des cellules solaires, non seulement permettre une absorption efficace de la lumière solaire, mais également conduire à des améliorations de la diffusion par rapport à la conception conventionnelle.

IV.5. Conclusion

Dans ce travail, l'accent est mis sur le rôle de la texturisation d'interface et en même temps l'incorporation des nanoparticules métalliques, sur l'amélioration de la performance optique des cellules solaires à hétérojonction à base de n-ZnO/p-Si, qui a été analysée numériquement en exploitant la méthode FDTD. L'étude s'est concentrée sur le comportement optique des cellules solaires intégrant l'effet des caractéristiques proposées. Il a été révélé à partir des résultats obtenus que les modifications de conception adoptées ont une implication profonde dans la réalisation d'une capacité de piégeage de lumière importante, qui permet la possibilité d'améliorer le rendement d'absorbance totale. Afin de stimuler la performance optique des cellules solaires, une nouvelle technique métaheuristique basée sur l'approche PSO a été développée avec succès dans le cadre de notre étude. Des résultats prometteurs ont été obtenus où la conception de cellule solaire optimisée surpasse largement la cellule solaire à base de n-ZnO/p-Si conventionnelle. Il a été démontré que le TAE a été amélioré d'environ 40% en incluant l'approche d'optimisation adoptée. On a également déduit que le comportement optique amélioré de la conception optimisée offre l'opportunité de surmonter le compromis entre les cellules solaires à haut rendement et le faible coût de fabrication. Les résultats rendent la cellule solaire à hétérojonction à base de n-ZnO/p-Si optimisée un candidat potentiel pour le développement de cellules solaires à haute performance optique et à faible coût.

Chapitre V

Elaboration d'hétéro-structures à base de métal/TCO/p-Si

V.1. Introduction	82
V.2. Détails expérimentaux et caractérisation électrique	83
V.2.1. Expérience	84
V.2.2. Pulvérisation cathodique magnétron RF (MOORFIELD MiniLab 060)	85
V.2.3. Caractérisation électrique.....	87
V.2.4. Extraction des paramètres FoMs	88
V.3. Résultats et discussion.....	89
V.3.1. Analyse de la stabilité thermique des SBDs à base de métal/TCO/p-Si.....	90
V.4. Conclusion.....	96

V.1. Introduction

Les oxydes conducteurs transparents (Transparent Conductive Oxides :TCO) tels que ZnO, TiO₂ et ITO ont attiré beaucoup d'attention en raison de leur potentiel à combler le fossé entre les propriétés de haute transparence et de faible résistivité [109-111]. Cette caractéristique pourrait potentiellement offrir de nouvelles fonctionnalités et de meilleures performances dans divers composants optoélectroniques conventionnels tels que les diodes électroluminescentes organiques (Organic Light Emitting Diodes : OLED), les cellules solaires, les photodétecteurs et les diodes à barrière Schottky (Schottky Barrier Diodes : SBD) [110-114]. Ces derniers sont constitués d'une structure métal/semiconducteur (M/S) dont les performances électriques sont fortement influencées par différents paramètres comme la hauteur de la barrière Schottky (Schottky Barrier Height : SBH), le dopage et la qualité de l'interface M/S [115-117]. Malheureusement, la mauvaise qualité de cette interface, la haute résistance série et la faible SBH associée à la structure conventionnelle métal/p-Si, constituent les inconvénients les plus prononcés des SBDs à base de Si [116-119]. Par conséquent, la connaissance approfondie des propriétés de l'interface et les principales raisons de la dégradation du composant sont particulièrement un problème essentiel pour identifier la combinaison appropriée de matériaux qui permet d'améliorer les performances des SBDs basés sur le Si. Dans ce contexte, le contrôle et l'ingénierie efficaces de cette interface offrent des possibilités plus larges non seulement de moduler la SBH, mais aussi de développer des interfaces avec un minimum de défauts qui pourraient améliorer le comportement redresseur du composant.

Au cours des dernières années, les chercheurs se sont concentrés sur ces problèmes persistants pour améliorer les propriétés électriques des SBDs à base de Si en insérant plusieurs inter-couches telles que des polymères, des oxydes métalliques et même des matériaux organiques [120-124]. En outre, des tentatives ont été faites jusqu'à présent pour améliorer les propriétés des SBDs à base de Si en utilisant divers contacts métalliques tels que Au, Pt et le métal hybride afin de moduler efficacement la SBH [125-129]. Grâce à l'insertion d'une couche intermédiaire, les SBDs à base de métal/Si permettent d'éviter l'effet de dégradation lié à la dislocation. Bien que cette réalisation soit étonnante, il existe un manque d'informations concernant le comportement de stabilité thermique des SBDs à base de Si, où peu d'études sont menées sur ce sujet, si important dans le cas des applications photovoltaïques et d'électronique de puissance. Par conséquent, réaliser des améliorations prometteuses concernant les propriétés électriques du composant, tout en assurant la stabilité thermique élevée, semble être d'une importance vitale pour développer des conceptions SBDs compétitives basées sur le Si pour la détection, les cellules solaires et les applications électroniques de puissance.

À notre connaissance, aucune conception de SBD à base de Si basée sur différentes inter-couches (ZnO et ITO) et des contacts métalliques (Au et Al) n'a été introduite pour réaliser simultanément des composants thermiquement stables et des performances électriques améliorées. Sur la base d'une étude expérimentale, nous réalisons dans ce travail une étude comparative des performances électrique et de stabilité thermique associées à différentes structures de SBD à base de Si, à savoir : Au/ITO/p-Si, Al/ZnO/p-Si et la structure conventionnelle Au/p-Si. Ces structures ont été élaborées au moyen de la technique de pulvérisation cathodique magnétron RF. Une caractérisation électrique efficace des structures SBDs élaborées à base de Si est réalisée, où leurs paramètres électriques sont extraits avec précision. De nouveaux paramètres de facteurs de mérite (Figures of Merit : FoMs) combinant à la fois des performances de stabilité électrique et thermique sont proposés afin d'évaluer à la fois la fiabilité du composant vis-à-vis des effets thermiques y compris les performances électriques. Il est révélé que les conceptions proposées avec des inter-couches de TCO peuvent potentiellement améliorer les caractéristiques SBD à base de Si, conduisant non seulement à des performances électriques fondamentalement améliorées, mais leur permettant également d'éviter efficacement les effets thermiques liés à la dégradation. De plus, les résultats obtenus permettent ainsi d'acquérir un résumé complet des compromis de conception SBD à base de Si par rapport aux différents FoMs du composant. Cela rend la conception proposée avec inter-couche TCO précieuse pour fournir des SBDs à base de Si, thermiquement stables et à hautes performances pour la détection, les cellules solaires Schottky et les applications d'électronique de puissance.

V.2. Aspects expérimentaux et caractérisation électrique

Principalement, le point fort des structures SBDs à base de Si proposées est d'introduire une couche mince de TCO intermédiaire distincte (ZnO et ITO) à l'interface M/S afin d'améliorer les performances du composant. De plus, nous suggérons l'utilisation de différents contacts métalliques (Au et Al) au sommet des structures SBDs proposées afin de montrer l'impact de travail de sortie du métal sur le paramètre SBH. L'épaisseur des couches minces de TCO introduites est considérée comme très mince ($t_{\text{TCO}} = 10 \text{ nm}$). La figure V.1 montre le schéma de la conception de SBD à base de métal/TCO/p-Si proposée, où t_{TCO} et t_{Si} décrivent respectivement les épaisseurs de TCO et du semi-conducteur qui est le silicium dans notre cas.

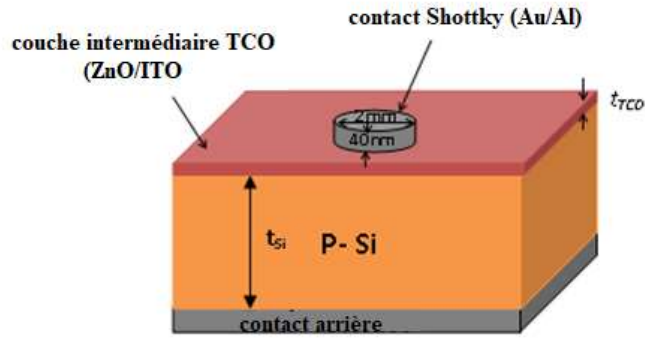


Figure V.1 : Schéma proposé de l'hétéro-structure de la SBD à base de métal/TCO/p-Si.

V.2.1. Expérience

Les SBDs à base de Si étudiées avec et sans couches d'interface TCO ont été élaborées sur une plaquette de Si de type p de 1 cm^2 de surface et d'orientation (100), avec $500 \mu\text{m}$ d'épaisseur, $10 \Omega\text{cm}$ de résistivité et $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ de dopage. Avant de réaliser les conceptions métal/TCO/p-Si proposées, les plaquettes ont été nettoyées dans le détergent commercial et ensuite passées dans un bain à ultrasons dans l'ordre suivant : 25 min dans l'éthanol puis rincées dans de l'eau déionisée chauffée à $90 \text{ }^\circ\text{C}$ et après, plongées pendant 25 min dans l'acétone, ensuite rincé avec de l'eau désionisée. Finalement, les plaquettes sont plongées dans l'acide HF pour retirer la fine couche oxyde natif puis rincées à l'eau désionisée et séchées sous un jet d'azote. Après le processus de nettoyage, une épaisseur de 50 nm en Au à haute pureté a été évaporée thermiquement sur la face arrière du substrat. Ensuite, des contacts en Au circulaires de 2 mm de diamètre ont été déposés sur la couche de p-Si en utilisant un masque métallique perforé. Par conséquent, les processus de conception et de fabrication de la SBD conventionnelle en Au/p-Si ont été achevés avec succès.

D'autre part, les couches intermédiaires de TCO associées aux SBDs à base de Si proposées ont été déposées au moyen de la technique de pulvérisation cathodique RF magnétron en utilisant le bâti MOORFIELD MiniLab 060. En optimisant à la fois la puissance de pulvérisation et la distance cible-substrat, nous avons pu contrôler l'uniformité et l'homogénéité des couches minces de TCO déposées. L'épaisseur des couches minces de TCO pulvérisée dans les structures Au/ITO/p-Si et Al/ZnO/p-Si était d'environ 10 nm. Après le dépôt des couches intermédiaires TCO, des contacts à géométrie circulaire de 2 mm de diamètre à base de métaux Au et Al ont été déposés respectivement sur le dessus des couches minces de TCO des deux hétéro-structures ITO/p-Si et ZnO/p-Si élaborés et nous avons ainsi obtenu les hétéro-structures Al/ZnO/p-Si et Au/ITO/p-Si.

V.2.2. Pulvérisation cathodique magnétron RF (MOORFIELD MiniLab 060)

Le phénomène de pulvérisation cathodique a été observé pour la première fois en 1852 par Grove puis en 1858 par Plucker. Ils ont constaté que lorsqu'une décharge électrique est appliquée entre deux électrodes en présence d'un gaz inerte sous pression réduite, il se forme sur la surface de l'anode une fine couche du matériau constituant la cathode. Cette observation de laboratoire est restée un siècle inexploitée à cause des difficultés technologiques liées à ce procédé. Dans les années 1950, les conditions expérimentales de la pulvérisation cathodique ont commencé à être définies. En 1965, des films ont été réalisés de manière industrielle. C'est en 1972 que le véritable développement de pulvérisation commençait à germer grâce à l'invention de la cathode magnétron [130].

La vaporisation du matériau source (espèce à déposer) est réalisée sous vide afin de conférer une grande pureté aux couches. Plus la pression est basse (< 10 Pa), plus les trajectoires des particules vaporisées seront rectilignes. Dans ce cas, seules les parties du substrat directement en regard de la source seront recouvertes.

Dans le cas de la pulvérisation cathodique, on applique une tension électrique entre les deux électrodes. Lorsque cette tension est suffisante, il y a ionisation de l'atmosphère (composée en général d'argon) et création d'un plasma de décharge luminescente. Les ions présents sont alors accélérés jusqu'à la cathode (la cible ou source du matériau à déposer). La mise en phase vapeur se fait alors suivant un processus purement mécanique, par transfert de l'énergie cinétique des ions aux atomes de la cible qui seront éjectés.

En général, la synthèse des revêtements par pulvérisation cathodique se déroule suivant trois grandes étapes [131] :

- création d'une vapeur métallique à partir d'une source solide (ou cible),
- transport de la vapeur vers le substrat à revêtir au sein d'une atmosphère raréfiée,
- condensation de cette vapeur à la surface du substrat, aboutissant à la formation d'une couche par germination et croissance.

Pour obtenir une décharge à plus basse pression avec une densité ionique plus importante et des espèces incidentes de plus forte énergie, mais en même temps augmenter la vitesse de dépôt, il est indispensable d'équiper la cathode d'un dispositif magnétron. Ce dernier est composé d'aimants permanents de polarités inverses installés à l'arrière de la cathode [131]. Ces aimants créent un champ magnétique (\vec{B}) parallèle à la surface de la cible,

perpendiculairement au champ électrique (\vec{E}). Les électrons émis par la cathode (électrons secondaire) et présents dans le gaz sont alors piégés par les lignes de champ magnétique. Il permet ainsi de confiner les électrons au voisinage de la cathode. Les électrons s'enroulent autour des lignes de champ magnétique (figure V.2), augmentant considérablement les probabilités d'ioniser une molécule de gaz ce qui permet d'accroître le taux d'ionisation du gaz.

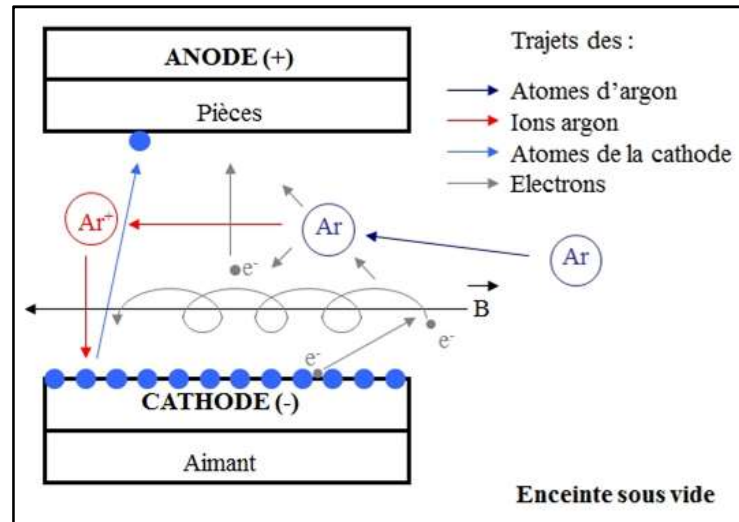


Figure V.2 : Principe de la pulvérisation cathodique magnétron RF [131]

Les principaux paramètres influençant la qualité du dépôt sont la pression, la nature du gaz, la puissance de l'alimentation et la température du substrat.

Fort heureusement pour nous, la salle blanche de l'université de Batna 2 est équipée des systèmes MiniLab de Moorfeld offrent ainsi ces performances de revêtement supérieures, avec la flexibilité et la modularité de la conception pour répondre à une vaste gamme d'exigences des chercheurs. La gamme MiniLab se compose de plusieurs plates-formes. Chaque plate-forme est généralement associée à une taille de chambre à vide spécifique. Alors que toutes les chambres sont construites selon les mêmes normes et permettent un fonctionnement à vide élevé, les chambres plus grandes permettent plus de techniques et de flexibilité que leurs homologues plus petites.

Les systèmes MiniLab 060 (figure V.3) sont des systèmes sous vide à fond plat pour le dépôt de métal, de diélectrique et de matières organiques minces. Tous les systèmes contiennent une chambre en acier inoxydable de type boîte avec porte avant pour le chargement / déchargement. La chambre est cubique et idéalement adaptée à la pulvérisation cathodique à magnétron. Un système de pompage turbo-moléculaire est standard, pour des pressions de base à vide poussé supérieures à 5×10^{-7} mbar.



Figure V.3 : Pulvérisateur cathodique MiniLab 060

V.2.3. Caractérisation électrique

Les caractéristiques I-V des SBDs fabriquées à base de Si avec différentes hétéro-structures à savoir Au/p-Si, Al/ZnO/p-Si et Au/ITO/p-Si ont été mesurées en utilisant le système Keithley 4200 SCS . L'impact de la variation thermique entre 20°C et 80°C sur les caractéristiques I-V des structures élaborées a également été réalisé afin d'évaluer la stabilité thermique des structures réalisées. Tout au long de la mesure, la tension balaye l'intervalle 0-1V. Ensuite, les paramètres électriques de base (ϕ_b , n , R_s et R_{sh}) qui régissent la performance des SBDs à base de Si ont été extraits en utilisant les caractéristiques I-V mesurées associées aux modèles étudiés sous variations thermiques. L'équation courant-tension à polarisation directe et inverse qui est régie par le modèle d'émission thermo-ionique peut être donnée comme suit [132-135]

$$I = I_s \exp\left(\frac{q(V - R_s I)}{n K T} - 1\right) \quad (\text{V.1})$$

où q désigne la charge d'électrons, k et T représentent la constante de Boltzmann et la température absolue, respectivement.

En utilisant le modèle d'émission thermo-ionique, le courant de saturation peut être exprimé par l'équation suivante [132-135]

$$I_s = S A_n^* T^2 \exp\left(\frac{-q\phi_{B_n}}{KT}\right) \quad (\text{V.2})$$

où, A_n^* est la constante de Richardson effective pour le semi-conducteur et S est la zone circulaire du contact métallique.

Sur la base de plusieurs travaux publiés qui s'intéressaient à l'analyse du comportement électrique de la conception des SBDs à base de Si, nous avons utilisé la caractéristique $\ln(I) = f(V)$ pour calculer les paramètres électriques du composant [127-129]. Dans cette caractéristique, nous pouvons fondamentalement trouver deux régions linéaires. La pente de la première partie donne la possibilité d'extraire le facteur d'idéalité, tandis que la pente de la seconde partie est exploitée pour calculer la résistance série des structures de SBD étudiées à base de Si. Sinon, l'intersection entre l'axe courant et la ligne interpolée de la première région linéaire permet d'identifier le courant de saturation. Après avoir estimé le courant de saturation, le paramètre SBH peut être calculé en utilisant l'équation. (V.2).

V.2.4. Extraction des paramètres FoMs

En fait, les effets thermiques liés à la dégradation sont considérés comme l'un des problèmes les plus importants qui empêchent l'obtention de SBD thermiquement stables et à haute performance. Dans ce contexte, l'étude exhaustive de la stabilité thermique des SBDs à base de Si reste d'une grande importance et complémentaire de leurs caractéristiques électriques. En conséquence, il semble crucial de proposer de nouveaux paramètres de FoMs de composants appelés facteurs de stabilité thermique qui combinent à la fois la performance électrique et, l'immunité du composant contre la variation thermique. Ces paramètres de performance peuvent être donnés par les formules suivantes :

$$n_{ts} = \frac{1}{n(\Delta n / \Delta T)} \quad (\text{V.3.a})$$

$$\phi_{ts} = \frac{\phi_b}{(\Delta \phi_b / \Delta T)} \quad (\text{V.3.b})$$

$$R_{s_{ts}} = \frac{1}{R_s(\Delta R_s / \Delta T)} \quad (\text{V.3.c})$$

$$R_{sh_{ts}} = \frac{R_{sh}}{(\Delta R_{sh} / \Delta T)} \quad (\text{V.3.d})$$

Il est important de noter que ces paramètres de performance doivent être maximisés afin d'obtenir des SBD à base de Si thermiquement stables et à haute performance.

V.3. Résultats et discussion

Dans cette section, nous avons des objectifs polyvalents. Tout d'abord, il est essentiel de faire une comparaison entre les différentes hétéro-structures élaborées afin de révéler le rôle des couches minces de TCO introduites sur les performances électriques des SBDs à base de Si. Deuxièmement, nous proposons une nouvelle étude efficace en utilisant les paramètres de FoMs proposés pour évaluer le comportement électrique des conceptions de SBD à base de métal/TCO/p-Si fabriqués sous variation thermique. Cela pourrait permettre d'identifier l'hétéro-structure la plus favorable qui offre une performance électrique supérieure avec une caractéristique de stabilité thermique élevée.

La figure V.4 montre les caractéristiques $I(V)$ mesurées associées à la conception Au/p-Si conventionnelle et aux SBDs à base de Si proposés avec différentes hétéro-structures (Au/ITO/p-Si et Al/ZnO/p-Si) avec $t_{\text{TCO}} = 10\text{nm}$. Il est clairement distingué qu'à partir de cette figure que les conceptions proposées avec couches intermédiaires TCO offrent une capacité du courant de dérive supérieur et un courant de fuite réduit par rapport à la conception de SBD Au/p-Si conventionnelle. Ceci peut potentiellement fournir la possibilité d'obtenir un comportement électrique amélioré, où les conceptions de SBD à base de Si proposées avec des structures hétéro-électriques Al/ZnO/p-Si et Au/ITO/p-Si présentent respectivement un rapport de redressement de l'ordre de 144dB et 129dB nettement supérieur à celui de la structure conventionnelle Au/p-Si (70dB). Afin d'explorer l'origine d'une telle amélioration, nous avons extrait les paramètres électriques associés aux conceptions SBDs élaborées à base de Si. On trouve que les SBDs à base de Al/ZnO/p-Si proposés présentent un facteur d'idéalité proche de l'unité ($n = 1,23$) par rapport aux hétéro-structures fabriquées avec Au/ITO/p-Si ($n = 2,1$) et Au/p-Si ($n = 2,4$), ce qui explique l'amélioration du comportement correcteur de cette conception.

D'un autre côté, un SBH amélioré de 0,75 et 0,72 eV est enregistré pour les deux conceptions de SBD à base de Si proposées avec des couches intermédiaires de ZnO et ITO contre 0,96 eV pour la structure conventionnelle, ce qui confirme l'efficacité des conceptions proposées pour moduler le SBH et réduire ainsi les fuites actuelles. L'insertion de couches minces de TCO peut modifier les alignements de bandes de l'hétérostructure conduisant à déplacer les bandes à l'interface M/S, ce qui permet une amélioration substantielle dans la SBH. Les valeurs de résistance en série des structures élaborées sont également extraites. Il est révélé que les conceptions proposées avec des couches minces TCO montrent une capacité exceptionnelle à améliorer le comportement résistif des SBDs à base de Si, où seulement 27Ω de résistance série peut être obtenue en considérant l'hétéro-structure Al/ZnO/p-Si. Cette

réussite peut être attribuée à l'amélioration de la qualité de l'interface M/S, où l'insertion de la couche intermédiaire TCO offre l'opportunité d'élaborer des interfaces avec un minimum de défauts. Ceci explique également la capacité du courant de dérive amélioré, obtenu par les conceptions proposées.

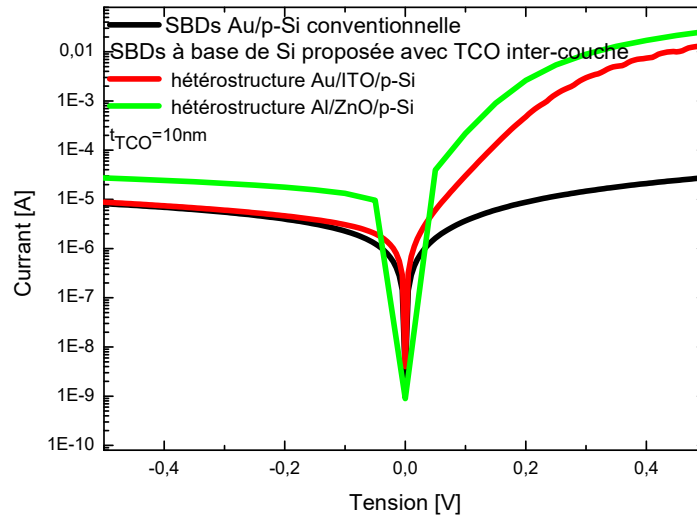


Figure V.4 : Caractéristique I-V semi-logarithmiques de la conception conventionnelle de la SBD Au/p-Si et de la conception proposée métal/TCO/p-Si à différentes inter-couches (ZnO et ITO) pour $t_{\text{TCO}} = 10$ nm.

V.3.1. Analyse de la stabilité thermique des SBDs à base de métal/TCO/p-Si

En fait, l'exploration de l'impact des couches minces intermédiaires de TCO introduites sur le comportement de stabilité thermique des SBDs à base de Si semble intéressante. Dans ce cadre, la Figure V.5 représente la variation du rapport de redressement en fonction de la température ambiante (T_{on}) pour les SBDs conventionnels et proposés à base de Si avec des hétérostructures dissemblables (Au/ITO/p-Si et Al/ZnO/p-Si) avec $t_{\text{TCO}} = 10$ nm. On peut remarquer à partir de cette figure que le rapport de redressement de la conception de SBD Au/p-Si conventionnelle diminue de 70 dB à 40 dB pour l'augmentation de température de 30 à 80 °C, respectivement. Cela peut souligner le comportement de stabilité thermique réduite de la structure conventionnelle, qui peut s'expliquer par les dommages considérables à l'interface M/S induits par les effets de chauffage. D'autre part, la figure V.5 montre aussi que les conceptions proposées avec des couches intermédiaires de TCO présentent un comportement amélioré de stabilité thermique ; où une légère diminution du taux de redressement est démontrée lorsque la température du milieu augmente. Les résultats expérimentaux mettent en évidence la propriété de haute stabilité thermique offerte par l'insertion de couche mince

intermédiaire TCO, qui ouvre la voie à la suppression de la dégradation liée aux effets thermiques. Le comportement de stabilité thermique obtenu des conceptions proposées peut être attribué à l'amélioration de la qualité et à l'homogénéité de l'interface M/S, où les couches minces de TCO insérées se comportent comme de bonnes couches de passivation.

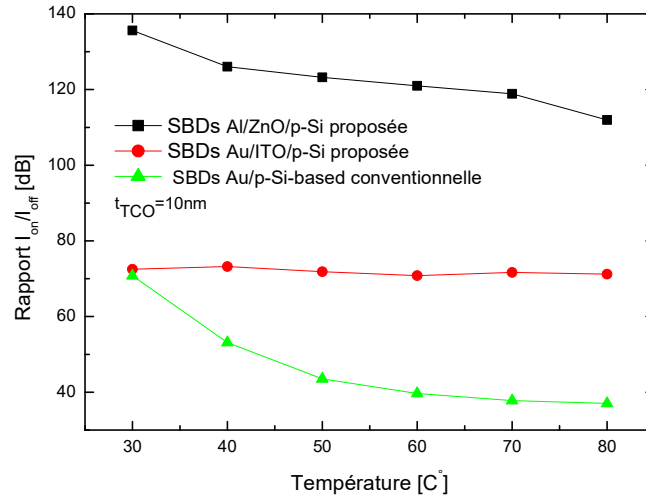


Figure V.5 : Variation du rapport de redressement en fonction de la température pour la conception Au/p-Si conventionnelle et des SBDs à base de Si proposés avec des inter-couches de TCO.

La figure V.6 compare le facteur d'idéalité et la SBH en fonction de la température de la conception hétérostructure proposée Al/ZnO/p-Si avec la structure conventionnelle SBD Au/p-Si. La figure V.6 montre clairement que les couches minces de TCO introduites présentent un meilleur comportement de stabilité thermique par rapport à la conception conventionnelle. En d'autres termes, la conception proposée montre une très lente aptitude à la hausse du facteur d'idéalité et de la SBH en fonction de l'augmentation de la température ambiante par-rapport à la réplique conventionnelle.

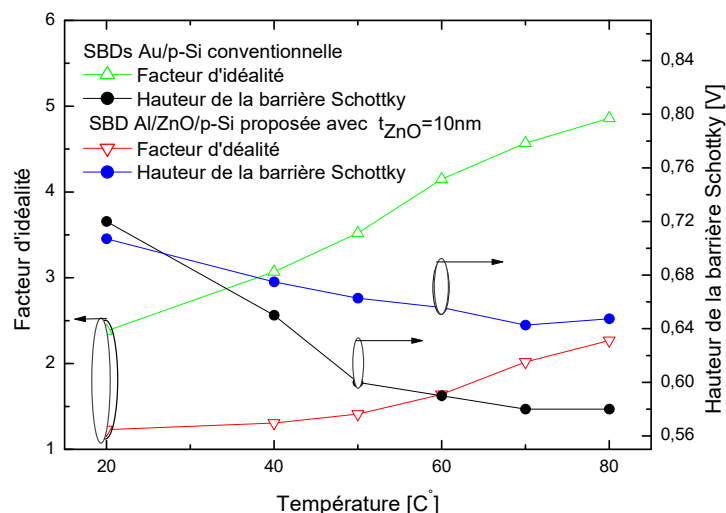
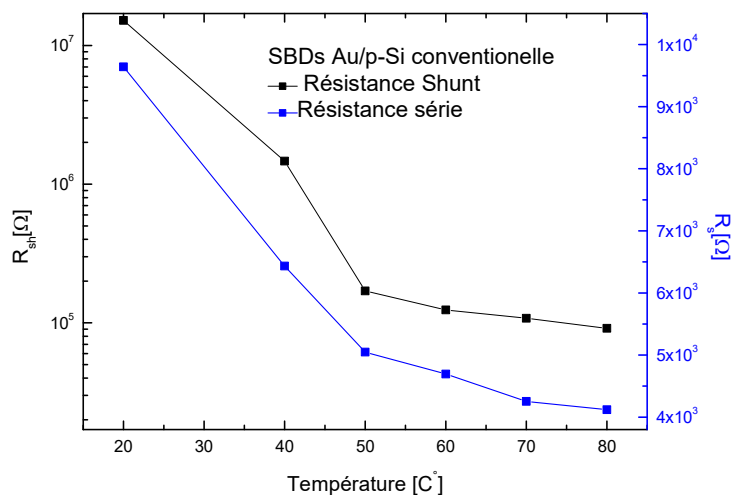
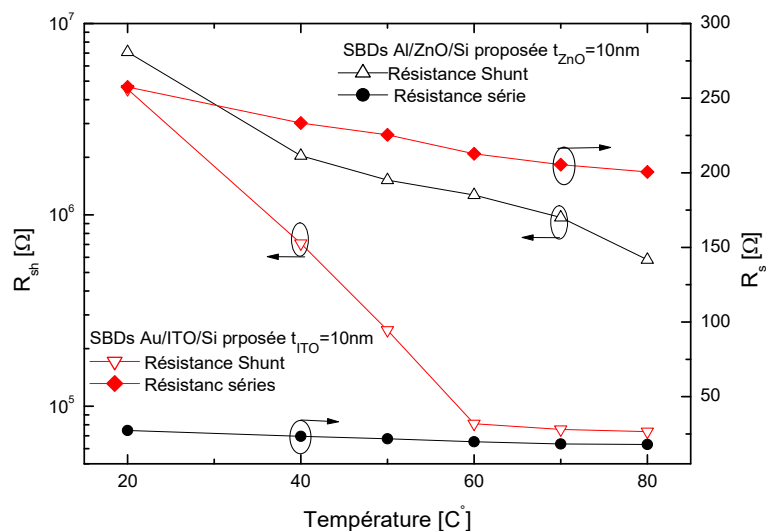


Figure V.6 : Variation à la fois du facteur d'idéalité et de la SBH en fonction de la température pour les SBD's conventionnelle à base de Au/p-Si et la conception proposée à hétérostructure Al/ZnO/p-Si.

Le but de ce travail est également d'élucider l'impact de la variation thermique sur le comportement résistif des SBDs élaborés à base de Si, ce qui peut nous donner un aperçu global pour sélectionner l'hétéro-structure appropriée pour concevoir des cellules solaires Schottky à Barrière efficaces. Dans cette mesure, la figure V.7 (a) illustre la variation des résistances parallèle et série en fonction de la température de la conception conventionnelle Au/p-Si, tandis que la figure V.7 (b) compare le comportement résistif de la SBD à base de Si avec des hétérostructures Métal/TCO/p-Si en variation thermique. En observant cette figure, nous pouvons remarquer que les conceptions proposées offrent un meilleur comportement résistif par rapport à la structure conventionnelle, où une résistance série réduite et une résistance shunt améliorée sont obtenues en insérant des couches minces de TCO. De plus, avec l'augmentation de la température, la résistance série est diminuée pour les conceptions étudiées, ce qui est principalement dû à l'amélioration de l'homogénéité à l'interface M/S. La conception étudiée avec couche intermédiaire ZnO offre la résistance shunt la plus élevée ($R_{\text{sh}} = 2 \text{ M}\Omega$) et la résistance série la plus faible ($R_{\text{s}} = 20 \text{ }\Omega$) sous variation thermique. Cela prouve l'efficacité de la conception de SBD à base de Si proposée avec une hétérostructure Al/ZnO/p-Si pour la conception de cellules solaires à haute performance et thermiquement stables.



(a)



(b)

Figure V.7 : Variation des résistances série et shunt en fonction de la température de la (a) SBD conventionnelle à base de Au/p-Si, (b) conceptions proposées à différentes couches intermédiaires de TCO (ZnO et ITO) avec $t_{TCO} = 10\text{nm}$.

Pour l'exhaustivité de ce travail, il est important d'évaluer les conceptions élaborées concernant les performances de stabilité électrique et thermique. Pour ce faire, nous calculons et comparons les FoMs proposés, associés à la conception conventionnelle et aux SBDs étudiées à base de Si à différentes couches intermédiaires de TCO. Dans cette perspective, nous extrayons les facteurs de stabilité thermique proposés des caractéristiques I-V, mesurées associées aux conceptions étudiées. La figure V.8 compare les FoMs de stabilité thermique des hétérostructures de la SBD fabriquées à base de Si. D'après cette figure, il est évidemment

démontré que les conceptions élaborées avec des couches intermédiaires de TCO présentent une amélioration des paramètres FoMs par rapport à la structure conventionnelle Au/p-Si, ce qui confirme leur potentiel à fournir des SBDs à haute performance avec une stabilité thermique améliorée.

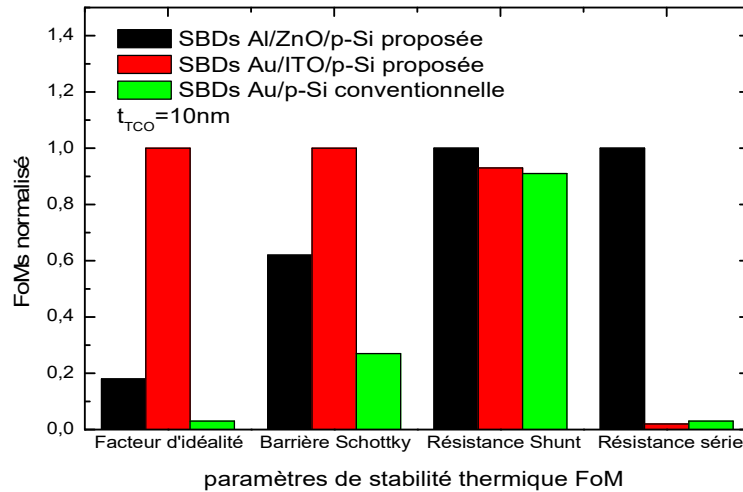


Figure V.8 : Comparaison entre les différents paramètres FoMs de stabilité thermique concernant la SBD conventionnelle à base de Au/p-Si et les modèles proposés comprenant les couches intermédiaires de TCO.

Plus important encore, cette figure révèle que la conception proposée en Au/ITO/p-Si offre des paramètres de FoM plus élevés associés au facteur d'idéalité et à la SBH, tandis que la SBD à base de Si proposée en Al/ZnO/p-Si fournit d'excellents FoMs à résistances shunt et série. Cette observation indique le comportement complexe des conceptions proposées avec des couches interfaciales en TCO, où l'identification du matériau approprié à l'interface M/S semble très difficile. En outre, le Tableau V.1 résume une comparaison des mesures de performances entre les conceptions de SBD conventionnelles et proposées à base de Si. D'après ce tableau, il est clairement démontré que la structure proposée avec des couches minces de TCO présente des propriétés électriques supérieures à celles de la conception conventionnelle. Il est confirmé expérimentalement qu'une amélioration de 20% du SBH peut être atteinte. En outre, la conception proposée donne une valeur de facteur d'idéalité la plus faible, $n = 1,23$. De plus, la structure élaborée Al/ZnO/p-Si offre la possibilité d'atteindre une valeur de résistance série extrêmement faible de 27Ω . De plus, les conceptions proposées offrent une progression de la stabilité thermique par rapport à la réplique conventionnelle, où des FoMs des composants améliorés sont enregistrés en insérant des couches intermédiaires de TCO.

Tableau V.1 : Comparaison globale des indicateurs de performance entre la SBD conventionnelle à base de Au/p-Si et les modèles proposés avec les différentes hétérostructures (Au/ITO/p-Si et Al/ZnO/p-Si).

Symbol	SBDs Au/p-Si conventionnelle	SBDs Au/ITO/p-Si proposées	SBDs Al/ZnO/p-Si proposées
Paramètres de conception :			
Épaisseur de l'TCO $t_{TCO}(nm)$	/	10	10
Épaisseur du Silicium $t_{Si}(\mu m)$	200	200	200
Dopage du Silicium $L_1(cm^{-3})$	2×10^{15}	2×10^{15}	2×10^{15}
Paramètres de Performance :			
facteur d'idéalité (n)	2.37	2.26	1.23
résistance séries (Ω)	9.64×10^3	257	27.15
Resistance Shunt (Ω)	1.51×10^7	4×10^6	7×10^6
Hauteur de la barrière Schottky (V)	0.69	0.75	0.72
Courant de derive I_{MAX} (A)	2.7×10^{-5}	1.3×10^{-2}	7×10^{-2}
Currant de saturation $I_s(\mu A)$	5×10^{-3}	8×10^{-4}	2.67×10^{-3}
Rapport de redressement (dB)	72	140	142
Stabilité thermique FOMs:			
facteur d'idéalité (n_{ts})	10.16	255.1	47.35
Hauteur de la barrière Schottky (ϕ_{ts})	308.53	1125	700
Résistance séries (Rs_{ts})	10^{-6}	4×10^{-3}	0.21
Résistance Shunt (Rsh_{ts})	60	60.5	65.37
Stabilité thermique	Très lent	Très élevé	Très élevé

En fait, cette étude comparative utilisant les paramètres FoMs peut permettre au concepteur de sélectionner l'hétéro-structure la plus appropriée aux applications distinctives. Le choix d'une conception SBD à base de Si par rapport à une autre impose des informations de haut niveau sur les facteurs liés à l'application potentielle, où les composants SBDs peuvent être utilisés pour concevoir différents circuits électroniques à semi-conducteurs. Par exemple, pour les applications photovoltaïques, la conception proposée avec la structure Al/ZnO/p-Si semble plus appropriée car son comportement résistif amélioré ainsi que son faible coût de fabrication. De plus, les performances électriques élevées obtenues en termes de facteur d'idéalité et de résistance en série améliorent le comportement du facteur de forme, ce qui fait de l'hétéro-structure proposée une solution alternative pour les cellules solaires Schottky à base de Si. D'autre part, la conception de SBD Au/ITO/p-Si étudiée pourrait être une bonne alternative pour concevoir un circuit électronique de puissance à haute performance dans lequel une stabilité thermique élevée concernant les paramètres électriques et un SBH supérieur sont extrêmement nécessaires.

En fin de compte, il est clairement démontré que l'introduction d'une couche mince intermédiaire TCO peut fortement améliorer les performances des SBDs à base de Si et apporter non seulement l'avantage d'obtenir un comportement résistif amélioré et un SBH élevé, mais conduit également à des composants thermiquement stables avantageux pour les applications de détection haute performance, photovoltaïque et électronique de puissance.

V.4. Conclusion

Dans ce chapitre, le rôle de l'insertion de différentes couches minces intermédiaires de TCO (ZnO et ITO) afin d'accomplir le double avantage d'une amélioration au niveau de la performance électrique et de la stabilité thermique des SBDs à base de Si est expérimentalement étudié. Les conceptions proposées ont été fabriquées en utilisant une technique de pulvérisation cathodique magnétron RF. Les avantages apportés par les hétérostructures proposées concernant les performances électriques et la stabilité thermique du composant ont été démontrés au moyen d'une étude comparative efficace, où il a été confirmé que les conceptions élaborées des SBDs à base de Si ouvrent ainsi la voie à de culminante performance. Les conceptions proposées avec des couches intermédiaires de TCO offrent le bénéfice technique de la SBH, qui permet d'enregistrer un taux de redressement élevé. De plus, la caractérisation électrique révèle que la conception proposée avec la couche d'interface ZnO présente un comportement résistif amélioré et un facteur d'idéalité réduit. Plus important encore, nous avons proposé de nouveaux paramètres FoM appelés facteurs de stabilité thermique qui combinent les performances de stabilité électrique et thermique. Il a été démontré que les hétéro-structures

proposées donnent des paramètres FoMs (Figures of Merit) supérieurs à la structure conventionnelle Au/p-Si, ce qui confirme leur efficacité pour fournir une nouvelle voie vers l'obtention de meilleures performances de stabilité électrique et thermique. Les résultats obtenus montrent que de la conception proposée peut être considérée comme une alternative potentielle pour l'élaboration de SBD thermiquement stables pour des applications de détection, photovoltaïque et électronique de puissance de haute performance.

Conclusion générale

Dans l'éventail des énergies qu'on peut qualifier de renouvelables, l'énergie photovoltaïque possède de nombreux atouts ; une majeure partie des technologies solaires développées à ce jour tente de remplir un objectif commun : améliorer le rapport rendement/coût des cellules photovoltaïques. Augmenter les rendements et diminuer les coûts de fabrication ce qui devrait donner plus de poids à l'énergie solaire et accélérer ainsi son exploitation.

En réduisant l'épaisseur des cellules solaires, la génération des photovoltaïques en couche-minces utilisée réduit les couts de fabrication, ainsi que la quantité de matière utilisée. Cependant, à cette réduction d'épaisseur de la couche absorbante des cellules sont liées des problématiques de baisse de rendement. Pour contrer ces effets indésirables, le travail de thèse détaillé dans ce manuscrit s'est donc déroulé par étapes.

La première phase de l'étude a été menée durant le développement et l'analyse des cellules solaires en hétéro-structures à base de SiGe, comprendre les mécanismes dont ils sont le siège et éventuellement les optimiser. Les capacités du matériau SiGe pour la détection proche infra-rouge sont notamment entrevues dans le chapitre suivant. Le deuxième chapitre a présenté une synthèse complète des paramètres nécessaires pour la simulation physique des couches SiGe/Si et a également développé un modèle complet de cellule solaire à multi-tranches à base de SiGe en fonction de la fraction molaire x de Germanium. Des structures photovoltaïques à multi-jonctions SiGe, voire mono-jonction SiGe, ont été présentées, sous un nouveau aspect, grâce à l'insertion de la couche intrinsèque i-a-SiGe:H munie des multi-tranches (p-a-Si:H). A travers l'optimisation des paramètres géométriques et physiques de ces multi-tranches, cela a permis d'améliorer les paramètres électriques des cellules solaires hétéro-structures en couches minces, ce qui confirme, l'augmentation du rendement relative de 20% pour la mono-jonction et de 69,60% pour la double-jonction.

Certes, les améliorations sont satisfaisantes à un certain seuil, mais incomplètes, puisque les défauts d'interface ont leur lot d'influences sur les paramètres électriques, ce qui fait que le troisième chapitre leur a été consacré. Après avoir mis le point sur les mécanismes de défaillance causés par leur présence, la solution pour les détourner a été l'application graduelle de la fraction molaire en germanium tout au long de l'épaisseur de la couche de SiGe. Grace à cette technique, on a pu passer d'un rendement de 16,4% pour une structure de cellule solaire conventionnelle à base de SiGe/Si, vers un rendement de 28,2% sur une cellule solaire hétéro-structure à fraction molaire graduelle en germanium suite à une amélioration du

courant de court-circuit de 62 mA/cm^2 , tout en s'affranchissant ainsi des pertes de recombinaison.

L'augmentation du rendement des cellules solaires ne s'arrête pas uniquement à l'amélioration des propriétés électriques, mais le perfectionnement des propriétés optiques a sa part dans cette étude, ce qui a conduit au quatrième chapitre dédiée au piégeage optique de la lumière. L'une des méthodes envisagée pour améliorer le piégeage optique de cellules à couches minces en Si est de tirer parti des effets plasmoniques qui apparaissent en présence de nanostructures métalliques. Ces effets plasmoniques sont fortement dépendants des paramètres géométriques du réseau métallique, ainsi que la texturisation d'interface. Devant la multitude des paramètres pouvant influencer sur la réponse plasmonique d'un réseau de nanostructures métalliques, des simulations numériques sont nécessaires. Pour réaliser cette étude, la méthode de calcul FDTD a été retenue. Les premiers calculs réalisés ont montré qu'il était préférable d'introduire ces nanoparticules au sein même de la couche absorbante. Une analyse finement détaillée a alors été réalisée, avec un calcul de l'absorption dans chacun des matériaux (AZO, ZnO, Si et Ag). En faisant varier principalement le diamètre des nanoparticules, ainsi que leur espacement, nous définissons ainsi les contours du design à réaliser par la suite, avec des nanoparticules de rayon de 30 nm, avec un espacement conséquent entre chacune d'elles de l'ordre de 26nm.

Afin de respecter les conditions de simplicité des dispositifs et de compatibilité avec les technologies industrielles existantes, nous avons donc cherché à explorer les potentialités de structures de cellule solaire hétéro-structure à travers la conception d'échantillon qu'on retrouve dans la partie expérimentale dédiée au travail de thèse, présentée dans le cinquième chapitre de ce manuscrit. Il consiste en l'exploitation de la technologie basée sur la jonction Schottky, qui est largement utilisée ailleurs dans le monde des dispositifs de puissance et des photo-détecteurs à base de Si, mais elle est très récente dans la technologie photovoltaïque Au/ITO/Si. Il a été constaté que la conception modifiée des diodes Schottky a une implication profonde dans l'amélioration de la fiabilité du dispositif vis-à-vis des variations thermiques. L'analyse expérimentale est réalisée en intégrant l'impact de l'épaisseur ITO sur la performance du dispositif, où une valeur d'épaisseur ITO appropriée peut améliorer les performances de stabilité électrique et thermique. Cela fait de la structure Au/ITO/Si une alternative potentielle pour des applications électroniques et photovoltaïques de puissance performantes et fiables.

Ce travail a permis d'identifier la plupart des verrous technologiques liés à l'amélioration des propriétés électriques et optiques des cellules solaires à hétéro-structures. Certains des verrous les plus limitant ont pu être levés, en alliant résultats expérimentaux et modélisations. La poursuite de l'étude devra concilier l'augmentation du rendement des cellules solaires à hétéro-structures avec un procédé de fabrication progressivement industrialisable.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] Philippe Collet, « L'Irena estime que toutes les énergies renouvelables seront compétitives face aux fossiles en 2020 », en ligne : <https://www.actu-environnement.com/ae/news/irena-cout-eolien-solaire-competitif-fossile-2020-30451.php4>
- [2] Marquet rapport series, Renewables 2017, Analysis and Forecasts to 2022, iea international energy agency, en ligne : <https://www.iea.org/Textbase/npsum/renew2017MRSsum.pdf>
- [3] International Energy Agency, “Technology Roadmap Solar Photovoltaic Energy,” 2014
- [4] M. A. Green, K. Emery, Y. Hishikawa, W. Warta, and E. D. Dunlop, “Solar cell efficiency tables (Version 45),” *Prog. Photovoltaics Res. Appl.*, vol. 23, no. 1, pp. 1–9, Jan. 2015.
- [5] G. M. Hanley, *Satellite Power Systems (SPS), Concept Definition Study Volume I Executive Summary*, NASA Contractor Report 3317, 1980.
- [6] Dragica Vasileska, ASU Gerhard Klimeck, Purdue, *Solar Cells Operation and Modeling*, 2010, en ligne : <https://nanohub.org/resources/911>
- [7] Romain CHAMPORY, *Cellules solaires silicium ultra-minces nanostructurées : conception électrooptique et développement technologique*, Thèse de doctorat Physique, UNIVERSITE DE LYON, 2016.
- [8] Keiichiro Masuko, Masato Shigematsu, Taiki Hashiguchi, Daisuke Fujishima, Motohide Kai, Naoki Yoshimura, Tsutomu Yamaguchi, Yoshinari Ichihashi, Takahiro Mishima, Naoteru Matsubara, Tsutomu Yamanishi, Tsuyoshi Takahama, Mikio Taguchi, Eiji Maruyama & Shingo Okamoto. Achievement of More Than 25% Conversion Efficiency With Crystalline Silicon Heterojunction Solar Cell . *Proceedings of the IEEE International Electron Devices Meeting*, vol. 4, pages 1433–1435, 2014
- [9] Jianhua Zhao, Aihua Wang & Martin Green. 24.5% Efficiency silicon PERT cells on MCZ substrates and 24.7% efficiency PERL cells on FZ substrates. *Progress in Photovoltaics : Research and Applications*, vol. 7, page 471–474, 1999.
- [10] M.A. Green, *Solar Cells; Operating Principles, Technology and Systems Applications*, Prentice-Hall, 1992.

- [11] Green MA, Blakers AW, Osterwald CR. Characterization of high-efficiency silicon solar cells. *Journal of Applied Physics* 1985; 58: 4402–4408.
- [12] Rudden M.N., Wilson J., „Elementare Festkörperphysik und Halbleiterelektronik“, Spektrum Akademischer Verlag, ©1995, 3. Auflage
- [13] N. Guillevin, L. J. Geerligs, R. C. G. Naber, W. Eerenstein, and A. W. Weeber, “High Efficiency ũ-type metal wrap through Si solar cells for low-cost industrial production”, in *Proceedings of the 25th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition, Valencia, Spain, 2010*, pp. 1429–1431.
- [14] W. Yin, X. Wang, F. Zhang, and L. Zhang, “19.6% cast mono-MWT solar cells and 268 W modules”, *IEEE Journal of Photovoltaics*, vol. 3, no. 2, pp. 697–701, 2013.
- [15] J.M. Gee, W. K. Schubert, P.A. Basore, “Emitter Wrap-Trough Solar Cell“, *Proc. 23rd IEEE PVSC*, pp. 265-70 (1993)
- [16] Tatsuo Saga, *Advances in crystalline silicon solar cell technology for industrial mass production*, *NPG Asia Mater.* 2 (3) 96–102 (2010)
- [17] W. Shockley and H. J. Queisser, “Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells,” *J. Appl. Phys.*, vol. 32, no. 3, pp. 510–519, 1961.
- [18] M. Ito et al, *Analysis of transmission losses of Very Large-Scale Photovoltaic power generation systems (VLS-PV) in world desert*, *Proceedings of 31st IEEE PVSC (2005)*, 1706-1709 pp.
- [19] *Development of Technology Commercializing Photovoltaic Power Generation System, Research and Development of Photovoltaic Power Generation Application System and Peripheral Technologies, Research and Development on the Evaluation Technology of Photovoltaic Power Generation system (2000)*, NEDO 27-38 pp
- [20] M. Gunes, Y. M. Li, R. M. A. Dawson, C. M. Fortmann & C. R. Wronski. Investigation of intrinsic defect states in hydrogenated amorphous silicon films using steady-state photoconductivity and sub-bandgap absorption . In *Photo-voltaic Specialists Conference, 1993.*, *Conference Record of the Twenty Third IEEE*, pages 885–890, May 1993
- [21] D.E. Carlson, *Tetrahedraffy Bonded Amorphous semiconduction*, édité par D. Adler et H. Fritzsche, Plenum Press, New york p. 165 (1985).

- [22] N Lequeux & M Cuniot. Internal photoemission measurements on a $-Si_{1-x}Ge_x : H/c - Si$ heterojunctions. *J. Non-Cryst. Sol.*, vol. 114, no. Part 2, pages 555–557, December 1989.
- [23] Aboubaçar NAMODA, Dégradation (effet staebler-'Wronski) et caractérisation des cellules solaires à base de silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H), thèse de Doctorat, Institut de physique et d'électronique, Université de Metz, 1999.
- [24] K. Okuda, H. Okamoto, Y. Hamakawa, Amorphous Si/Polycrystalline Si Stacked Solar Cell Having More Than 12% Conversion Efficiency, *Japanese journal of applied physics* (1983) 22, 9, pp.L605-L607, DOI : 10.1143/JJAP.22.L605
- [25] M. A. Green; K. Emery; Y. Hishikawa; W. Warta; E. D. Dunlop, *Prog. Photovolt: Res. Appl.*, 2011, 19, 565-572.
- [26] Ingrid Repins, Miguel A Contreras, Brian Egaas, Clay DeHart, John Scharf, Craig L Perkins, Bobby To, and Rommel Noufi. 19.9%-efficient ZnO/CdS/CuInGaSe₂ solar cell with 81.2% fill factor. *Progress in Photovoltaics : Research and Applications* ,16(3) :235–239, May 2008.
- [27] Sunghun Jung, SeJin Ahn, Jae Ho Yun, Jihye Gwak, Donghwan Kim, and Kyun-ghoon Yoon. Effects of Ga contents on properties of CIGS thin films and solar cells fabricated by co-evaporation technique. *Current Applied Physics*, 10(4) :990–996, July 2010.
- [28] R. Caballero, C.a. Kaufmann, T. Eisenbarth, M. Cancela, R. Hesse, T. Unold, a. Eicke, R. Klenk, and H.W. Schock. The influence of Na on low temperature growth of CIGS thin film solar cells on polyimide substrates. *Thin Solid Films*, 517(7) :2187–2190, February 2009
- [29] B.M. Keyes, F. Hasoon, P. Dippo, A. Balcioglu, and F. Abulfotuh. Influence of Na on the electro-optical properties of Cu(In,Ga)Se₂. *Conference Record of the Twenty Sixth IEEE Photovoltaic Specialists Conference - 1997*, pages 479–482, 1997.
- [30] D Braunger. Influence of sodium on the growth of polycrystalline Cu(In,Ga)Se₂ thin films. *Thin Solid Films*, 361-362(1-2) :161–166, February 2000.
- [40] Brian O'Regan & Michael Grätzel, A low-cost, high-efficiency solar cell based on dye-sensitized colloidal TiO₂ films, *Nature* volume 353, pages 737–740 (24 October 1991), doi:10.1038/353737

- [41] A. Hagfeldt; G. Boschloo; L. Sun; L. Kloo; H. Pettersson, *Chem. Rev.*, 2010, 110, 6595-6663. 26. L. Schmidt-Mende; U. Bach; R. Humphry-Baker; T. Horiuchi; H. Miura; S. Ito; S. Uchida; M. Grätzel, *Adv. Mater.*, 2005, 17, 813-815.
- [42] U. Bach; D. Lupo; P. Comte; J. E. Moser; F. Weissortel; J. Salbeck; H. Spreitzer; M. Gratzel, *Nature*, 1998, 395, 583-585.
- [43] Jay B. Patel , Rebecca L. Milot , Adam D. Wright , Laura M. Herz , and Michael B. Johnston « Formation Dynamics of CH₃NH₃PbI₃ Perovskite Following Two-Step Layer Deposition » *The Journal Of Physical Chemistry Letters* 2015.
- [44] A. Kojima, K. Teshima, Y. Shirai et T. Miyasaka, "Organometal Halide perovskite as visible light sensitizers for photovoltaic cells", *J. Am. Chem. Soc.* 131, 6050-6051 (2009).
- [45] G. Giorgi, et al. *J. Phys. Chem. Lett.* 4 (2013) 4213–4216.
- [46] M. Era, S. Morimoto, T. Tsutsui, S. Saito, *Appl. Phys. Lett.* 65 (6) (1994) 676–678.
- [47] R. Houdré, C. Weisbuch, R.P. Stanley, U. Oesterle, P. Pellandini, M. Ilegems, *Phys. Rev. Lett.* 73 (15) (1994) 2043–2046.
- [48] Mahboobeh Shahbazi, Hongxia Wang, Progress in research on the stability of organometal perovskite solar cells, *Solar Energy*, Volume 123, January 2016, Pages 74–87
- [49] Nam-GyuPark, Perovskite solar cells: an emerging photovoltaic technology, Volume 18, Issue 2, *Materialstoday*, March 2015, Pages 65-72
- [50] K. Said, J. Poortmans, M. Caymax, J. F. Nijs, “Design fabrication and analysis of crystalline Si–SiGe heterostructure thin-film solar cells,” *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 46, pp. 2103–2110, 1999.
- [51] G. Allan, B. Richard, C. Alen, “Performance analysis of large scale, amorphous silicon photovoltaic power systems,” *proceeding of photovoltaic Specialist Conference and Exhibition, USA; 2005.* Y. Jeffrey, B. Arindam, G. Subhendu, “Amorphous silicon based
- [52] Y. Jeffrey, B. Arindam, G. Subhendu, « Amorphous silicon based Photovoltaics from earth to the final frontier » *Sol. Energy Mater.Sol.Cells*, Vol. 78, pp.597-612, 2003 ;
- [53] Kabir M I, Ibrahim Zahari, Sopian Kamaruzzaman, et al. Effect of structural variations in amorphous silicon based single and multi-junction solar cells from numerical analysis. *Solar Energy Materials & Solar Cells*, 2010, 94 (9): 1542

- [54] A. Bouzidi, H. Hamzaoui, A S Bouazzi, et al. Analytic computation of the photocurrent density in a n-6H–SiC/p-Si/n-Si/p-Si_{0.8}Ge_{0.2} multilayer solar cell. *Microelectronics Journal*, 2006, 37: 388.
- [55] T. Bendib, F. Djeflal, D. Arar, M. Meguellati, “Fuzzy logic based approach for organic solar cell parameters extraction”, *Lecture Notes in Electrical Engineering (LNEE)*, Vol. 2, LNECS, pp. 1182-1185, 2013
- [56] K. Kacha, F. Djeflal, T. Benstrcia, D. Arar, M. Meguellati and M. Chahdi, “Numerical investigation of the SiGe/Si heterostructure including interfacial defects for photovoltaic applications”, *Advanced Materials Research*, Vol. pp. 188-192, 2014.
- [57] K. Kacha, F. Djeflal, T. Bentrchia, M. Meguellati, “Equivalent circuit modeling of SiGe/Si solar cell including interfacial defect effects”, 14th IEEE International conference on Sciences and Techniques of Automatic control & computer engineering, STA'2013, pp; 265-268, Sousse, Tunisia, 2013.
- [58] S.T. Chang, M.H. Liao, W.K. Lin, “Si/SiGe hetero-junction solar cell with optimization design and theoretical analysis,” *Thin Solid Films*, Vol. 519, pp. 5022–5025, 2011.
- [59] A. Daamia, A. Zerraia, J.J. Marchanda, J. Poortmansb, G. Brémonda, “Electrical defect study in thin-film SiGe/Si solar cells,” *Materials Science in Semiconductor Processing*, Vol. 4, pp. 331–334, 2001.
- [60] H. Tasaki, W. Y. Kim, M. Hallerdt, M. Konagai and K. Takahashi, “Computer simulation model of the effects of interface states on high-performance amorphous silicon solar Cells”, *Journal of Applied Physics*, Vol. 63, pp. 550-560, 1988.
- [61] M. Kemp, M. Meunier and C. G. Tannous, “*Solid State Electronics*, Vol. 32, pp. 149-157, 1989.
- [62] M. Hack and J. G. Shaw, “Numerical simulations of amorphous and polycrystalline silicon thin-film transistors”, in *Proceedings of the Conference on solid State Devices and Materials*, pp. 999-1002, Sendai, Japan, 1990.
- [63] Jean-Luc POLLEUX, CONTRIBUTION À L'ÉTUDE ET À LA MODÉLISATION DE PHOTOTRANSISTORS BIPOLAIRES À HÉTÉROJONCTION SIGE/SI POUR LES APPLICATIONS OPTOMICROONDES thèse de doctorat en électronique, *CONSERVATOIRE NATIONAL DES ARTS ET MÉTIERS*, 2001

- [64] T. Füller, M. Konuma, J. Zipprich, F. Banhart¹, “The critical thickness of silicon-germanium layers grown by liquid phase epitaxy,” *Appl. Phys. A* 69, 597–603, 1999.
- [65] Said Khalid, Poortmans Jozef, Caymax Matty, et al. Design, fabrication, and analysis of crystalline Si–SiGe heterostructure thin-film solar cells. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 1999, 46: 2103
- [66] Kim Yang Doo, Han Kang Soo, Shin Ju Hyeon, et al. Functional patterns for thin-film-type amorphous silicon solar cells. *Japanese Journal of Applied Physics*, 2014, 53: 072301
- [67] Kanematsu Daiji, Yata Shigeo, Aya Yoichiro, et al. Quantitative measurement and design of texture morphology for high-efficiency thin-film silicon solar cells. *Japanese Journal of Applied Physics*, 2014, 53: 076501
- [68] Fortes M, Comesan E, Rodriguez J A, et al. Impact of series and shunt resistances in amorphous silicon thin film solar cells. *Solar Energy*, 2014, 100: 114
- [69] Atlas User’s manual: Device Simulation Software, 2012.
- [70] J. Yang, A. Banerjee, S. Guha, “Triple-junction amorphous silicon alloy solar cell with 14.6% initial and 13.0% stable conversion efficiencies,” *Applied Physics Letters*, Vol. 70, pp. 2975–2977, 1997.
- [71] S. Guha, J. Yang, B. Yan, “High efficiency multi-junction thin film silicon cells incorporating nanocrystalline silicon,” *Solar Energy Materials & Solar Cells*, Vol. 119, pp. 1–11, 2013.
- [72] Y. Wanga, A. Gerger, A. Lochtefeld, L. Wanga, C. Kerestes, R. Opila, A. Barnett, “Design, fabrication and analysis of germanium: silicon solar cell in a multi-junction concentrator system,” *Solar Energy Materials & Solar Cells*, Vol. 08, pp.146–155, 2013.
- [73] M.H. Liao, “The demonstration of a highly efficient SiGe Type-II hetero-junction solar cell with an optimal stress design,” *Thin Solid Films*, Vol.544, pp.112-115, 2013.
- [74] J. Poortmans and V. Thin Film Solar Cells (Fabrication, Characterisation and Applications), John Wiley & Sons, Arkhipov (eds) (2007)
- [75] M.H. Liao, “The demonstration of a highly efficient SiGe Type-II hetero-junction solar cell with an optimal stress design,” *Thin Solid Films*, Vol.544, pp.112-115, 2013.

- [76] A. Cheknane, H. S. Hilal, F. Djeflal, B. Benyoucef, J-P. Charles, “An equivalent circuit approach to organic solar cell modelling,” *Microelectronics Journal*, vol. 39, pp. 1173–1180, 2008.
- [77] International Energy Agency. Technology roadmap: Solar photovoltaic energy. Technical report, International Energy Agency, 2010.
- [78] M. A. Green, “Crystalline and thin-film silicon solar cell: state of the art and future potential”, *Solar energy*, vol.74, pp. 181-192, 2003.
- [79] K. Masuko, M. Shigematsu, T. Hashiguchi, D. Fujishima, M. Kai, N. Yoshimura, T. Yamaguchi, Y. Ichihashi, T. Mishima, N. Matsubara, T. Yamanishi, T. Takahama, M. Taguchi, E. Maruyama, S. Okamoto, “Achievement of more than 25% conversion efficiency with crystalline silicon heterojunction solar cell,” *IEEE J.Photovolt*, vol.4, pp. 1433–1435, 2014.
- [80] U. Jain, S. C. Jain, J. Nijs, J. R. Willis, R. Bullough, R. P. Mertens and R. Van Overstraeten, ‘Calculation of critical-layer-thickness and strain relaxation in $GexSi_{1-x}$ strained layers with interacting 60 and 90 degrees dislocations’, *Solid State Electronics*. vol.36, no.3; ; p.331–337 (1993).
- [81] K. Yoshikawa, H. Kawasaki, W. Yoshida, T. Irie, K. Konishi, K. Nakano, T. Uto, D. Adachi, M. Kanematsu, H. Uzu and K. Yamamoto, “Silicon heterojunction solar cell with interdigitated back contacts for a photoconversion efficiency over 26%,” *Nature energy*, vol.2, pp. 1–8, 2017.
- [82] L. Lin, Y. Chiou, “Improving thin-film crystalline silicon solar cell efficiency with back surface field layer and blaze diffractive grating, *Solar Energy*,” vol.86, pp. 1485–1490, 2012
- [83] M. Wolf, R. Brendel, J. H. Werner and H. J. Queisser, ‘Solar cell efficiency and carrier multiplication in $Si_{1-x}Gex$ alloys’, *Journal of Applied Physics*. vol.83; p.4213–4221 (1998).
- [84] O. Kruger, W. Seifert, M. Kittler, A. Gutjahr, M. Konuma, K. Said and J. Poortmans, ‘Electrical properties of SiGe epitaxial layers for photovoltaic application as studied by scanning electron microscopical methods’, *Diffusion and Defect Data Part B (Solid-State-Phenomena)*. vol.63–64; p.509–518 (1998) ;

- [85] Han S. E, "Toward the lambertian limit of light trapping in thin nanostructured silicon solar cells," *Nano Lett.*, vol.10, pp.4692, 2010.
- [86] Marc LAMY de la CHAPELLE, Nanoparticules métalliques, Laboratoire CSPBAT UMR7244 - UFR Santé, Médecine et Biologie Humaine - Université Paris 13.
- [87] M.J. Kerr, P. Campbell, A. Cuevas, Lifetime and efficiency limits of crystalline silicon solar cells, *Proceedings of the 29th IEEE Photovoltaic Specialists Conference (2002)* 438–441.
- [88] K. Kacha, H. Ferhati, D. Arar, M. Meguellati, Numerical investigation of a double-junction a: SiGe thin-film solar cell including the multi-trench region, *J. Semicond.* 36 (2015) 1–5.
- [89] B. Hekmatshoar, D. Shahrjerdi, M. Hopstaken, J.A. Ott, D.K. Sadana, characterization of thin epitaxial emitters for high-efficiency silicon hetero-junction solar cells, *Appl. Phys. Lett.* 101 (2012) 103906.
- [90] H. Fritzsche, Photo-induced structural changes associated with the Staebler-Wronski effect in hydrogenated amorphous silicon, *Solid State Commun.* 94 (1995) 953–955.
- [91] S.A. Mansour, F. Yakuphanoglu, Electrical-optical properties of nanofiber ZnO film grown by sol gel method and fabrication of ZnO/p-Si heterojunction, *Solid State Sci.* 14 (2012) 121–126.
- [92] K.E. Knutsen, R. Schifano, E.S. Marstein, B.G. Svensson, A. YuKuznetsov, Prediction of high efficiency ZnMgO/Si solar cells suppressing carrier recombination by conduction band engineering, *Phys. Status Solidi A* 210 (2013) 585–588.
- [93] I. Repins, M.A. Contreras, B. Egaas, C. DeHart, J. Scharf, C.L. Perkins, B. To, R. Noufi, 19.9% efficient ZnO/CdS/CuInGaSe₂ solar cell with 81.2% fill factor, *Prog. Photovolt. Res. Appl.* 16 (2008) 235–239.
- [94] M. Novotny, J. Cizek, R. Kuzel, J. Bulir, J. Lancok, J. Connolly, E. McCarthy, S. Krishnamurthy, J.P. Mosnier, W. Anwand, G. Brauer, Structural characterization of ZnO thin films grown on various substrates by pulsed laser deposition, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 45 (2012) 225101.
- [95] R. Kumar, S. Chand, Structural, optical, and electrical characterization of al/n-ZnO/p-Si/Al hetero-structures, *J. Electron. Mater.* 44 (2015) 194–201.

- [96] H. Ferhati, F. Djeffal, New high performance ultraviolet (MSM) TiO₂/glass photodetector based on diffraction grating for optoelectronic applications, *Optik* 127 (2016) 7202–7209.
- [97] H. Ferhati, F. Djeffal, Role of optimized grooves surface – textured front glass in improving TiO₂ thin film UV photodetector performance, *IEEE Sens. J.* 16 (2016) 5618–5624.
- [98] M. Clerc, The particle swarm – explosion, stability, and convergence in a multidimensional complex space, *J. IEEE Trans. Evolut. Comput.* 73 (2002) 6–58.
- [99] F. Djeffal, N. Lakhdar, A. Yousfi, An optimized design of 10-nm-scale dual-material surrounded gate MOSFETs for digital circuit applications, *Phys. E: Low-Dimens. Syst. Nanostruct.* 44 (2011) 339–344.
- [100] F. Djeffal, T. Bendib, R. Benzid, A. Benhaya, An approach based on particle swarm computation to study the nanoscale DG MOSFET-based circuits, *Turk. J. Elect. Eng. Comput. Sci.* 18 (2010) 988–992.
- [101] BOUKHENOUDA Nouredine, Contribution à l'étude des propriétés des films minces à base de ZnO, thèse de doctorat en microélectronique, université MBB Batna 2, 2017.
- [102] Marc LAMY de la CHAPELLE, Nanoparticules métalliques, Laboratoire CSPBAT UMR7244 - UFR Santé, Médecine et Biologie Humaine - Université Paris 13.
- [103] C. F. BOHREN, D. R. HUFFMAN, Absorption and Scattering of Light by Small Particles, Wiley VCH, Weinheim, 1983.
- [104] G. A. MIE, « Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen », *Annalen der Physik*, **25**, 377-445 (1908).
- [105] H. C. VAN DE HULST, *Light Scattering by Small Particles*, Dover Publications, New York, 1981.
- [106] W. J. WISCOMBE, « Mie Scattering Calculations : Advances in Technique and Fast, Vector Speed Computer Codes », note technique, National Center for Atmospheric Research, Boulder, CO, USA (1996).
- [107] Ghosh B.; and R. Espinoza-González, Plasmonics for Improved Photovoltaic Devices, *JOJ Material Sci*, Volume 1 Issue 2 - May 2017.

- [108] H.T. Liu and P. Lalanne, « Microscopic model for the extraordinary optical transmission », *Nature*, 452, 728-731 (2008).
- [109] J. Meyer, S. Hamwi, M. Kreoger, W. Kowalsky, T. Riedl, A. Kahn, “Transition metal oxides for organic electronics: energetics, device physics and applications,” *Adv. Mater.*, vol. 24, pp. 5408-5427, 2012.
- [110] W. Wu, J. Bao, X. Jia, Z. Liu, L. Cai, B. Liu, J. Song, H. Shen, “Dopant-free back contact silicon heterojunction solar cells employing transition metal oxide emitters,” *Phys. Status Solidi*, vol.10, pp. 662-667, 2016.
- [111] K. Kacha, F. Djeflal, H. Ferhati, D. Arar and M. Meguellati, “Numerical investigation of a double-junction a:SiGe thin-film solar cell including the multi-trench region,” *Journal of Semiconductors*, vol.36, pp 1-5, 2015.
- [112] F.Srairi, F. Djeflal and H. Ferhati, “Efficiency increase of hybrid organic/inorganic solar cells with optimized interface grating morphology for improved light trapping,” *Optik*, vol. 130, pp. 1092-1098, 2017.
- [113] Hamwi, J. Meyer, M. Kroger, T. Winkler, M. Witte, T. Riedl, A. Kahn, W. Kowalsky, “The role of transition metal oxides in charge-generation layers for stacked organic light-emitting diodes,” *Adv. Funct. Mater.*, vol.20, pp.1762–1766, 2010.
- [114] H. Ferhati, F. Djeflal, “A novel high-performance self-powered ultraviolet photodetector: Concept, analytical modeling and analysis,” *Superlattices and Microstructures*, vol. 112, pp.480-492, 2017.
- [115] J. Chen and J. Lv, Q. Wang, “Electronic properties of Al/MoO₃/p-InP enhanced Schottky barrier contacts,” *Thin Solid Films*, vol.616, pp.145-150, 2016.
- [116] T. Teraji, Y. Koide, T. Ito, “Schottky barrier height and thermal stability of p-diamond (100) Schottky interfaces,” *Thin Solid Films*, vol.557, pp. 241-248, 2014.
- [117] S. J. Young, S. J. Chang, L. W. Ji, T. H. Meen, C. H. Hsiao, K. W. Liu, K. J. Chen, Z. S. Hu, “Thermally stable Ir/n-ZnO Schottky diodes,” *Microelectronic Engineering*, vol.88, pp. 113-116, 2011.
- [118] O. Demircioglu, S. Karatas, N. Yıldırım, O.F. Bakkaloglu, A. Turut, “Temperature dependent current voltage and capacitance voltage characteristics of chromium Schottky contacts formed by electrodeposition technique on n type Si,” *J. Alloys Compd.*, vol.509, pp.6433-6439, 2011.
- [119] A. D. Bartolomeo, “Graphene Schottky diodes: An experimental review of the rectifying graphene/semiconductor heterojunction,” *Physics Reports-Review Section of Physics Letters*, vol. 606, pp. 1-58, 2016.

- [120] H. G. Çetinkaya, Ş. Altındal, I. Orak, I. Uslu, "Electrical characteristics of Au/n-Si (MS) Schottky Diodes (SDs) with and without different rates (graphene+Ca_{1.9}Pr_{0.1}Co₄O_x-doped poly(vinyl alcohol)) interfacial layer," *J Mater Sci: Mater Electron*, vol. 28, pp. 7905–7911, 2017.
- [121] Y. Tsuboi, F. Wang, D. Kozawa, K. Funahashi, S. Mouri, Y. Miyauchi, T. Takenobu and K. Matsuda, "Enhanced photovoltaic performances of graphene/Si solar cells by insertion of a MoS₂ thin film," *Nanoscale*, vol. 34, pp. 14476-82, 2015.
- [122] Ü. Gürsel, M. Gökçen, A. Allı, "Improving effect of poly (linolenic acid)-g-poly (caprolactone)-g-poly (t-butyl acrylate) interfacial layer on Au/n-Si diodes," *Materials Chemistry and Physics*, vol.213, pp.1-5, 2018.
- [123] S. Mahato, J. Puigdollers, "Temperature dependent current-voltage characteristics of Au/n-Si Schottky barrier diodes and the effect of transition metal oxides as an interface layer," *Physica B: Condensed Matter*, vol.530, pp. 327-335, 2018.
- [124] S. Mahato, "Composition analysis of two different PEDOT:PSS commercial products used as an interface layer in Au/n-Si Schottky diode," *RSC Adv.*, vol.7, pp. 47125, 2017.
- [125] S. Nadiah, C. A. Shaharin, F. A. Rahman, A. Nawabjan, A. M. Hashim, "Junction properties analysis of silicon back-to-back Schottky diode with reduced graphene oxide Schottky electrodes," *Microelectronic Engineering*, vol.196, pp. 32-37, 2018.
- [126] S. Nadiah, C. A. Shaharin, F. A. Rahman, A. Nawabjan, A. M. Hashim, "Fabrication and electrical characterization of nickel/p-Si Schottky diode at low temperature," *Solid State Sciences*, vol.58, pp. 115-121, 2016.
- [127] B. W. Liou, "Barrier height adjustment of Schottky barrier diodes using a double-metal structure," *Thin Solid Films*, vol.545, pp. 509-513, 2013.
- [128] V. E. Gora, A. Chawanda, C. Nyamhere, F. D. Auret, F. Mazunga, T. Jaure, B. Chibaya, E. Omotoso, H. T. Danga, S. M. Tunhuma, "Comparison of nickel, cobalt, palladium, and tungsten Schottky contacts on n-4H-silicon carbide," *Physica B: Condensed Matter*, vol.535, pp. 333-337, 2018.
- [129] R. Kumar, S. Chand, "Fabrication and electrical characterization of nickel/p-Si Schottky diode at low temperature," *Solid State Sciences*, vol.58, pp. 115-121, 2016.
- [130] C. Manasterski, *La pulvérisation cathodique industrielle*, PPUR presses polytechniques, 2005.
- [131] F. Lapostolle. "Caractérisation de revêtements TiO_x ($0 \leq x \leq 2$) élaborés sur métal ou sur verre par pulvérisation cathodique magnétron en condition réactive."Thèse de doctorat, Institut national polytechnique de Lorraine, France, 2001.

- [132] S.M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*, second ed., Wiley, New York, 1981. p. 245.
- [133] T. T. Mnatsakanov, M. E. Levinshtein, A. G. Tandoev, S. N. Yurkov, J. W. Palmour, "Minority carrier injection and current–voltage characteristics of Schottky diodes at high injection level," *Solid-State Electronics*, vol. 121, pp 41-46, 2016.
- [134] S. Averine, Y. C. Chan, and Y. L. Lam, "Evaluation of Schottky contact parameters in metal–semiconductor–metal photodiode structures," *Applied Physics Letters*, vol. 77, pp. 274-276, 2000.
- [135] A.H. Kacha, B. Akkal, Z. Benamara, M. Amrani, A. Rabhi, G. Monier, C. Robert-Goumet, L. Bideux, B. Gruzza, "Effects of the GaN layers and the annealing on the electrical properties in the Schottky diodes based on nitrated GaAs," *Superlattices and Microstructures*, vol. 83, pp. 827-833, 2015.

Annexe A

Les algorithmes génétiques

Le concept d'**algorithme génétique** (de façon plus générale : algorithmes d'évolution) a été proposé par Holland en 1975 pour décrire les systèmes adaptatifs. Les algorithmes génétiques, également appelés **algorithmes évolutionnaires**, sont inspirés du concept de sélection naturelle proposée par Charles Darwin. Le vocabulaire employé est directement calqué sur celui de la théorie de l'évolution et de la génétique. Nous parlerons donc ici d'individus (solutions potentielles), de populations, de gènes (variables), de chromosomes, de parents, de descendants, de reproductions, etc. Les points de l'espace de recherche sont alors les individus d'une population et la fonction à optimiser correspond à leur adaptation. Ces algorithmes font évoluer une population de manière itérative. Certains individus se reproduisent, d'autres mutent ou encore disparaissent et seuls les individus les mieux adaptés sont supposés survivre. L'héritage génétique des générations doit permettre à la population d'être de mieux en mieux adaptée et donc de mieux répondre au critère d'optimisation. Les principales étapes d'un algorithme génétique sont :

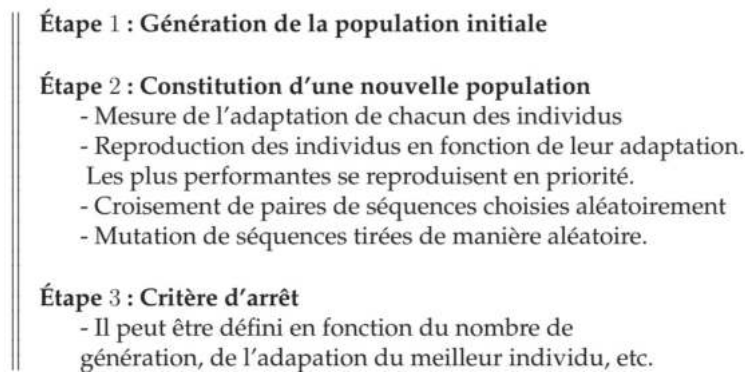


FIGURE A.1 – Les différentes étapes des algorithmes génétiques

Algorithme Génétique à plusieurs objectifs : Multiple Objective Genetic Algorithm (MOGA)

En 1993 Fonseca a proposé une méthode dans laquelle chaque individu de la population est rangé en fonction du nombre d'individus qui le dominent. Ensuite, ils utilisent une fonction de notation permettant de prendre en compte le rang de l'individu et le nombre d'individus ayant même rang.

Soit un individu x_i à la génération t , dominé par $p_i(t)$ individus. Le rang de cet individu est :

$$\text{rang}(x_i, t) = 1 + p_i(t)$$

Tous les individus non dominés sont de rang 1. Ils calculent la fitness de chaque individu de la façon suivante :

- Calcul du rang de chaque individu.
- Affectation de la fitness de chaque individu par application d'une fonction de changement d'échelle sur la valeur de son rang.

L'utilisation de la sélection par rang a tendance à répartir la population autour d'un même optimum. Or cela n'est pas satisfaisant pour un décideur car cette méthode ne lui proposera qu'une seule solution. Pour éviter cette dérive, les auteurs utilisent une fonction de **sharing**. Ils espèrent ainsi répartir la population sur l'ensemble de la frontière de Pareto. Le sharing utilisé dans cette méthode agit sur l'espace des objectifs. Cela suppose que deux actions qui ont le même résultat dans l'espace des objectifs ne pourront pas être présentes dans la population.

D'une manière générale, cette méthode obtient des solutions de bonne qualité et son implémentation est facile. Mais les performances sont dépendantes de la valeur du paramètre σ_{share} utilisé dans le sharing. Dans leur article, Fonseca et Fleming expliquent comment choisir au plus juste la valeur de σ_{share} .

Optimisation multi-objective

L'optimisation multi-objective est un domaine fondamental de l'aide à la décision multicritère, nécessaire aux nombreux milieux scientifiques et industriels. Au cours des deux dernières décennies, un très grand nombre de travaux, à la fois théoriques et appliqués, ont été publiés dans ce domaine. La résolution d'un problème d'optimisation multi-objective consiste à déterminer la solution correspondante au mieux aux préférences du décideur parmi les solutions de bon compromis. L'une des questions les plus difficiles est donc liée à l'identification de l'ensemble Pareto optimal, ou d'une approximation de celui-ci pour des problèmes complexes.

Cette partie a pour but d'introduire les prérequis nécessaires à la bonne compréhension de cette thèse. Ainsi, dans un premier temps, nous présenterons le contexte de l'optimisation multi-objective, les principales définitions, et les problématiques essentielles liées à ce domaine de recherche, surtout vis à vis des approches de résolution pour lesquelles nous allons essayer d'apporter un regard critique sur chacune d'elles.

a) Formulation d'un problème multi-objectif

Un problème multi-objectif ou multicritère peut être défini comme un problème où on cherche à optimiser plusieurs composantes des vecteurs de la fonction objectif, toute en satisfaisant un ensemble de contraintes. Contrairement à un problème mono-objectif, la solution n'est pas unique mais constituée d'un ensemble de solutions dites de **Pareto optimales**.

La formulation mathématique d'un problème d'optimisation multi-objectif est donnée comme suit :

$$POM \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{Minimiser } F(x) = (f_1(x), \dots, f_\ell(x))^T \\ \text{Sous les contraintes} \\ h_i(x) = 0 \quad , i = 1, \dots, m, \\ g_j(x) \geq 0 \quad , j = 1, \dots, k, \\ x_L \leq x \leq x_U \end{array} \right.$$

avec $x \in \mathbb{R}^d$ est le vecteur des variables de décision, $\{f_1, \dots, f_\ell\}$ est l'ensemble des fonctions objectif.

La difficulté principale d'un problème multi-objectif est qu'il n'existe pas de définition de la solution optimale. Le décideur peut simplement exprimer le fait qu'une solution est préférable à une autre, mais il n'existe pas une solution meilleure que toutes les autres. Dès lors, résoudre un problème multi-objectif ne consiste pas à rechercher la solution optimale mais l'ensemble

des solutions satisfaisantes pour lesquelles on ne pourra pas effectuer une opération de classement. Les méthodes de résolution des problèmes multi-objectifs sont donc des méthodes d'aide à la décision car le choix final sera laissé au décideur.

Pour répondre à ce problème, la communauté scientifique a adopté deux types de comportement.

- Ramener un problème multi-objectif à un problème mono-objectif en utilisant des pondérations.
- Tenter d'apporter des réponses au problème en prenant en considération l'ensemble des fonctions objectif.

Il est très difficile de recommander à 100 % un comportement par rapport à l'autre. La différence entre ces deux comportements s'exprime dans la figure ci-dessous. Soit le décideur intervient dès le début de la définition du problème, en exprimant ses préférences, afin de transformer un problème multi-objectif en un problème mono-objectif. Soit le décideur effectue son choix dans l'ensemble des solutions proposées par la méthode d'optimisation multi-objective.

La principale qualité d'une méthode d'optimisation multi-objective est donc de rendre les décisions plus faciles et moins subjectives.

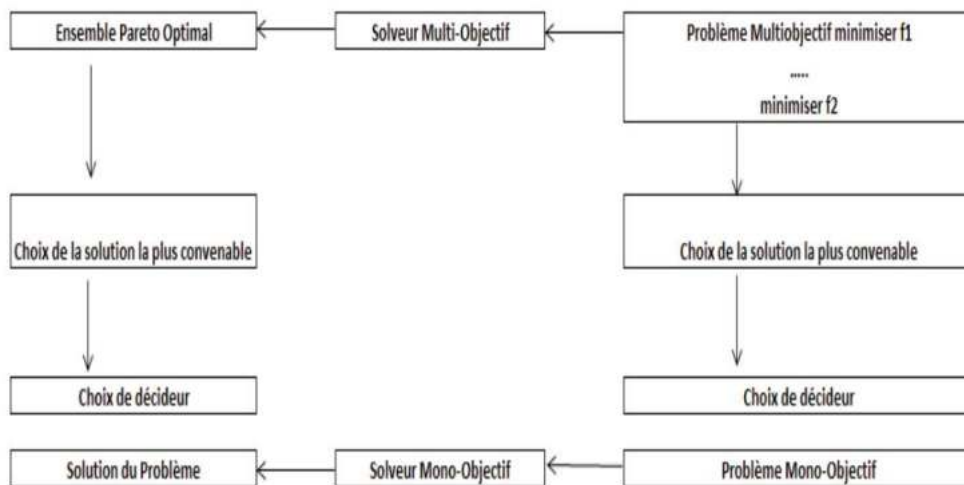


FIGURE A.2 – Schéma des deux types de comportement en optimisation multi-objectif

b) Classification des méthodes d'optimisation multi-objectives

Ce classement s'articule autour des notions de transformation et d'optimum de Pareto :

- Les méthodes agrégées ;
- Les méthodes fondées sur Pareto ;
- Les méthodes non agrégées et non Pareto.

Les méthodes agrégées ou l'utilisation de la dominance de Pareto traitent les objectifs simultanément, alors que, les méthodes dites non agrégées et non Pareto possèdent un processus de recherche qui traite séparément les objectifs.

Annexe B**La méthode des essais particulières**

L'optimisation par essaim particulière (OEP) est une métaheuristique d'optimisation née en 1995 aux États-Unis sous le nom de Particle Swarm Optimization (PSO). Elle a été inventée par Russel Eberhart (ingénieur en électricité) et James Kennedy (socio-psychologue). Initialement, ces deux concepteurs, cherchaient à modéliser des interactions sociales entre des « agents » devant atteindre un objectif donné dans un espace de recherche commun, chaque agent ayant une certaine capacité de mémorisation et de traitement de l'information. La règle de base était qu'il ne devait y avoir aucun chef d'orchestre, ni même aucune connaissance par les agents de l'ensemble des informations, seulement des connaissances locales. Un modèle simple fut alors élaboré.

Dès les premières simulations, le comportement collectif de ces agents évoquait celui d'un essaim d'êtres vivants convergeant parfois en plusieurs sous-essaims vers des sites intéressants. Ce comportement se retrouve dans bien d'autres modèles, explicitement inspirés des systèmes naturels. Ici, la métaphore la plus pertinente est probablement celle de l'essaim d'abeilles, particulièrement du fait qu'une abeille ayant trouvé un site prometteur sait en informer certaines de ses consœurs et que celles-ci vont tenir compte de cette information pour leur prochain déplacement. Finalement, le modèle s'est révélé être trop simple pour vraiment simuler un comportement social, mais par contre très efficace en tant qu'outil d'optimisation.

Les différentes étapes de l'algorithme sont présentées dans la figure ci-dessous :

- 1 – Initialiser la population de particules avec des positions et vitesses aléatoires.
- 2 – Evaluer la fonction objectif pour chaque particule et calculer g .
- 3 – Pour chaque individu i , L_i est initialisée à P_i .
- 4 – Répéter jusqu'au critère d'arrêt
 - 4.1 – Mettre à jour les vitesses et les positions des particules;
 - 4.2 – Evaluer la fonction objectif pour chaque individu;
 - 4.3 – Calculer les nouveaux L_i et g .
- 5 – Afficher le meilleur état rencontré au cours de la recherche.

FIGURE B.1 : Les différentes étapes de la méthode des essais particulières

L'algorithme commence avec une initialisation aléatoire de l'essaim de particules dans l'espace de recherche. Chaque particule est modélisée par sa position dans l'espace de recherche et par sa vitesse. A chaque instant, toutes les particules ajustent leurs positions et vitesses, donc leurs trajectoires, par rapport à leurs meilleures positions, à la particule ayant la meilleure position dans l'essaim et à leur position actuelle. En réalité, chaque particule est influencée, non seulement par sa propre expérience, mais aussi par celle des autres particules. La position et la vitesse d'une particule dans un espace de recherche à N dimensions sont définies par :

$P_i = (p_{i,1}, \dots, p_{i,N})$ et $V_i = (v_{i,1}, \dots, v_{i,N})$, respectivement. Chaque particule est caractérisée par sa meilleure position $L_i = (l_{i,1}, \dots, l_{i,N})$ à l'itération t .

La meilleure position qu'atteint l'essaim est sauvegardée dans le vecteur $G = (g_1, \dots, g_N)$. La vitesse de chaque particule est mise à jour selon l'expression suivante :

$$v_{ij}(t+1) = K[w.v_{ij}(t) + c_1.r_1.(l_{ij} - v_{ij}(t)) + c_2.r_2.(g_j - v_{ij}(t))]$$

$$v_{ij}(t+1) = K[w.v_{ij}(t) + c_1.r_1.(l_{ij} - v_{ij}(t)) + c_2.r_2.(g_j - v_{ij}(t))]$$

et

$$K = \frac{2}{|2 - \varphi - \sqrt{\varphi^2 - 4\varphi}|}$$

où $\phi = c1 + c2$ et $\phi > 4$. Dans, les auteurs suggèrent les valeurs suivantes $j = 1, \dots, N$, w est une constante appelée facteur d'inertie, $c1$ et $c2$ sont des constantes appelées coefficients d'accélération, $r1$ et $r2$ sont des nombres aléatoires uniformément distribués dans l'intervalle $[0 1]$.

Si la vitesse calculée fait sortir une particule de l'espace de recherche, sa fitness n'est pas calculée. Compte tenu de la nouvelle vitesse, obtenue à partir de (a) et (b), la position à l'itération $t + 1$ est alors calculée : $p_{ij}(t + 1) = p_{ij}(t) + v_{ij}(t + 1)$, $j = 1, \dots, N$.

Annexe C

FDTD Method

Why Use FDTD Simulation Software?

While many electromagnetic simulation techniques are applied in the frequency-domain, FDTD solves Maxwell's equations in the time domain. This means that the calculation of the electromagnetic field values progresses at discrete steps in time. One benefit of the time domain approach is that it gives broadband output from a single execution of the program; however, the main reason for using the FDTD approach is the excellent scaling performance of the method as the problem size grows. As the number of unknowns increases, the FDTD approach quickly outpaces other methods in efficiency. FDTD has also been identified as the preferred method for performing electromagnetic simulations for biological effects from wireless devices [1]. The FDTD method has been shown to be the most efficient approach and provides accurate results of the field penetration into biological tissues.

A Brief Summary - FDTD Simulation Basics

In the FDTD approach, both space and time are divided into discrete segments. Space is segmented into box-shaped cells, which are small compared to the wavelength. The electric fields are located on the edges of the box and the magnetic fields are positioned on the faces as shown in Figure 1. This orientation of the fields is known as the Yee cell [2, p. 37] and is the basis for FDTD. Time is quantized into small steps where each step represents the time required for the field to travel from one cell to the next. Given the offset in space of the magnetic fields from the electric fields, the values of the field with respect to time are also offset. The electric and magnetic fields are updated using a leapfrog scheme where first the electric fields, then the magnetic, are computed at each step in time.

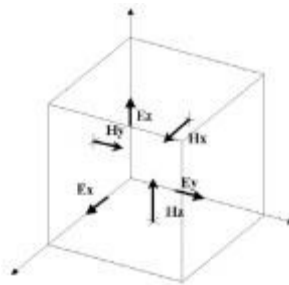


Figure 1: The Yee cell with labeled field components

When many FDTD cells are combined together to form a three-dimensional volume, the result is an FDTD grid or mesh. Each FDTD cell will overlap edges and faces with its neighbors, so by convention each cell will have three electric fields that begin at a common node associated with it. The electric fields at the other nine edges of the FDTD cell will belong to other, adjacent cells. Each cell will also have three magnetic fields originating on the faces of the cell adjacent to the common node of the electric fields as shown in Figure 1.

Within the mesh, materials such as conductors or dielectrics can be added by changing the equations for computing the fields at given locations. For example, to add a perfectly conducting wire segment to a cell edge, the equation for computing the electric field can be replaced by simply setting the field to zero since the electric field in a perfect conductor is

identically zero. By joining numerous end-to-end cell edges defined as perfectly conducting material, a wire can be formed. Introducing other materials or other configurations is handled in a similar manner and each may be applied to either the electric or magnetic fields depending on the characteristics of the material. By associating many cell edges with materials, a geometrical structure can be formed within the FDTD grid such as the dielectric sphere shown in Figure 2. Each small box shown in the figure represents one FDTD cell.

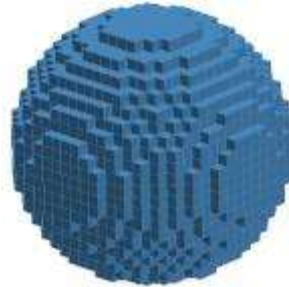


Figure 2: A dielectric sphere as meshed in an FDTD grid. The individual cell edges (electric field locations) are displayed as overlapping grid lines.

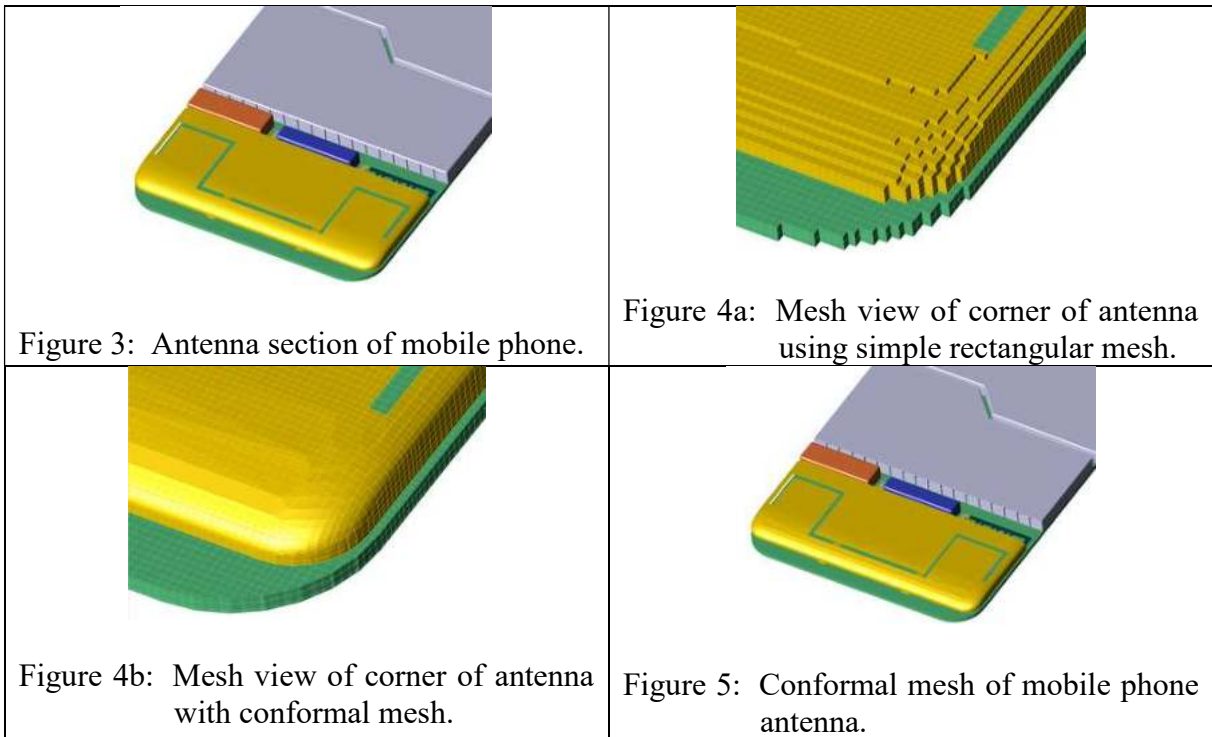
The cell size, the dimensions of the small box, is the most important constraint in any FDTD simulation since it determines not only the step size in time, but also the upper frequency limit for the calculation. A general rule of thumb sets the minimum resolution, and thus the upper frequency limit, at ten cells per wavelength. In practice the cell size will often be smaller than this in order to resolve dimensions and features of the structure to be simulated such as the thickness of a substrate or the length of a wire.

An excitation may be applied to an FDTD simulation in many different ways. One method emulates exciting a geometry at discrete locations by applying a sampled waveform to the field update equation at one or more locations. At each step in time, the value of the waveform over that time period is added into the field value. The surrounding fields will propagate the introduced waveform throughout the FDTD grid appropriately, depending on the characteristics of each cell. A calculation must continue until a state of convergence has been reached. This typically means that all field values have decayed to essentially zero (at least 60dB down from the peak) or a steady-state condition has been reached.

Refinements to the Basic Yee Cell

The square Yee cell of Figure 1 can in general be rectangular. The spacings between cells in the x, y, and z-directions can vary throughout the problem space. This allows more cell edges to be placed in regions of strong fields, such as around small features of highly conductive material. Within a cell, the standard update equations of FDTD may be refined in many ways, for example to allow for wires that are thinner than a cell size. Another refinement can allow for objects whose surface intersects the cell at arbitrary angles with respect to the principle axes. These “conformal” cells can be further refined to account for curvature of the object surface within the volume of the cell.

Figure 3 shows the geometry of a portion of a mobile phone. For clarity, the visibility of many of the parts, including the outer case, has been turned off to show the region near the antenna. A small portion of the FDTD mesh of the phone is shown in Figure 4a using simple rectangular cells. In Figure 4b the same part of the phone mesh is shown, this time using a type of conformal treatment for cells which contain portions of the surface of an object. Figure 5 shows a larger view of the surfaces of the conformal mesh.



Materials

FDTD simulation software is capable of simulating a wide variety of electric and magnetic materials. The most basic material of course is free space. All FDTD cells are initialized as free space and the fields at all cell edges are updated using the free space equations unless another material is added to replace the free space.

Perfectly conducting electric and magnetic materials are simulated by setting the electric or magnetic field to zero for any cell edges located within these materials. Because of the simplicity of the calculation for these materials, it is better to use a perfect conductor rather than a real conductor whenever feasible. Conductors such as copper can be simulated in FDTD, but since the equations for computing the fields in copper material are more complicated than those for a perfect conductor, the calculation will take longer. Of course for cases where only a small percentage of the FDTD cells are defined as a conductor, the difference in execution time will hardly be noticeable.

Frequency independent dielectric and magnetic materials are defined by their constitutive parameters of relative permittivity and conductivity for the electrical material, or relative permeability and magnetic conductivity for the magnetic material. In many cases, even when performing a broadband calculation, these materials are appropriate since the parameters do not vary significantly over the frequency range.

In some cases a frequency independent material is not appropriate and instead a frequency dependent, or dispersive, material should be substituted. Some common examples of frequency dependent materials are high water content materials such as human tissues, metals when excited at optical frequencies, and dielectrics over wide bandwidths. Included in XFDTD is the capability to simulate electric and magnetic Debye and Drude materials such as plasmas, Lorentz materials, and anisotropic magnetic ferrites, as well as frequency independent anisotropic dielectrics. These materials may have permittivities or permeabilities that are negative at some frequencies, making them effective for simulating metamaterials

macroscopically. FDTD is also particularly effective at simulating nonlinear materials, several of which are included in XFDTD.

Near-Zone Versus Far-Zone

For any given calculation the geometry of the structure being simulated is defined by setting the cell edges at specific locations to certain materials. The entire FDTD geometry space, commonly called the grid or the mesh, is composed of a three dimensional block of these cells. This three dimensional volume is considered to be the near-zone region in FDTD in terms of the data storage. The field value at any edge in the FDTD grid may be observed as a function of time by saving a “near-zone” point in XFDTD. Other types of data such as steady-state field magnitudes, specific absorption rates, S-parameters, or impedance may be stored as well for appropriate points, surfaces, and volumes within the grid.

It is possible to make an FDTD grid that is large enough to allow sampling of points in the far field of a geometry. In general this will be extremely costly in terms of computer memory and calculation time since the number of unknowns (cells) will most likely be large. Note that each FDTD cell has a maximum size of one-tenth of a wavelength, so moving many wavelengths away from a structure will require a large number cells. In most cases this is not an appropriate method of monitoring far field results.

A more practical method for transforming field values to the far-zone and for calculations of radiation gain or radar scattering patterns is to use a transformation to convert the near-zone values in the FDTD grid into a far field value at some location away from the grid. This is done by enclosing the geometry in a box and storing the fields on the outer faces of this box for general far-zone problems. The faces of the box are located five FDTD cells from each outer edge of the FDTD grid. For the transformation to be valid, all parts of the FDTD geometry must be contained within the box.

The polar coordinate system used in XFDTD is defined with the azimuthal (ϕ) angle referenced from the x-axis and the elevation (θ) angle referenced from the z-axis, as shown in Figure 6. This coordinate system is used for locating far-zone positions and for defining the incident plane wave direction.

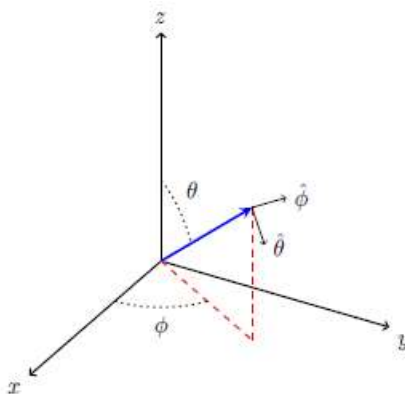


Figure 6: Polar coordinate system used for far-zone and incident plane wave directions.

Broadband And Steady-State Calculations

Generally a broadband calculation is performed with FDTD since a single calculation can yield results for a wide range of frequencies without requiring extra computer resources. When data at particular frequencies are required, steady-state data may be computed from the broadband calculation by means of a Fourier transform.

Common examples of data vs frequency include antenna patterns at specific frequencies, biological applications such as the Specific Absorption Rate (SAR), electric and magnetic field magnitudes, magnetic flux magnitudes, conduction currents, and “circuit” type information such as S-Parameters, group delay, impedance, power, efficiency, etc.

Sinusoidal excitation may be desired in certain occasional cases, such as when avoiding a strong resonance near, but outside of, the frequency range of interest.

Outer Radiation Boundaries

A three-dimensional grid of cells forms the FDTD geometry and the fields updated at every cell location are dependent on the neighboring fields. However, due to memory limitations the grid must end at some point and because of this, the fields on the outer edges of the grid cannot be updated correctly. To correct this situation, outer radiation boundary conditions are applied at the edges of the FDTD grid.

The outer radiation boundary is a method for absorbing fields propagating from the FDTD grid toward the boundary. By absorbing these fields, the grid appears to extend forever. The performance of the outer boundaries is an important factor in the accuracy of an FDTD calculation and care should be taken to correctly use them.

In some cases a reflecting boundary rather than an absorbing one is preferred. A perfectly conducting boundary (either electric or magnetic) may be used to image the fields in an FDTD calculation to take advantage of problem symmetries. A periodic boundary condition is useful for simulating a single unit cell of a large symmetrical geometry.

Computer Resources

FDTD is a computationally intensive method and most reasonable calculations will need a fast computer and at least a few Gigabytes of computer memory. For most applications it is fairly simple to estimate the amount of computer memory required for a calculation. The most important factor for the memory usage, and in large part the run time, is the number of FDTD cells used to represent the structure under test. Each FDTD cell has six field values associated with it: three electric fields and three magnetic fields. Additionally each cell has six flags associated with it to indicate the material type present at each of the six field locations. The field values are real numbers, each four bytes in length, while the flags may each be one byte. This gives a memory usage per FDTD cell of 24 bytes for fields and 6 bytes for flags for a total of 30 bytes. To estimate the total memory required, in bytes, simply multiply the number of FDTD cells by the 30 bytes per cell value. There is some overhead in the calculation, but it is generally quite small. One notable exception is the broadband far-zone angles that allocate six one dimensional real value arrays per direction.

Estimating the execution time of an FDTD calculation is more complicated since performance of computer processors varies. One method of estimating is to compute the total number of operations to be performed. There are about 80 operations per cell, per time step during the FDTD calculations. The total number of operations is found from the product of the number of

cells, the number of time steps, and the factor of 80 operations per cell, per time step. If a value of the floating-point performance of the processor is known, a value for execution time can be computed. In general though, a better estimating method is to determine the execution time of a simple problem on a given computer and then scale the time by the ratio of the number of operations between the desired calculation and the simple one.

There are many ways to increase computation speed of FDTD, though some will require considerable effort to program. Some of the most effective are to use multiple CPUs of a computer in parallel, use multiple computers in parallel, optimize computation loops for cache, or take advantage of parallel methods on CPUs such as SSE and AVX. FDTD software is especially well suited to computation on GPU processors as the notion of many cells performing a relatively small number of update algorithms in parallel fits well with the methods developed for updating video displays.

Travaux publiés

- * Ferhati, H., Djeffal, F., Kacha, K., Optimizing the optical performance of ZnO/Si-based solar cell using metallic nanoparticles and interface texturization Optik, 2018, Volume 153, January 2018.
- * K. Kacha, F. Djeffal, H. Ferhati, D. Arar and M. Meguellati , Numerical investigation of a double-junction a:SiGe thin-film solar cell including the multi-trench region, 2015.
- * K. Kacha, F. Djeffal, T. Bentrchia, D. Arar, M. Meguellati, M. Chahdi, Numerical investigation of the SiGe/Si heterostructure including interfacial defects for photovoltaic applications, Advanced Materials Research, 2014.
- * Kacha, K., Djeffal, F., Bentrchia, T., Meguellati, M., Chahdi, M., Improving the efficiency of thin-film SiGe solar cells through the optimization of intrinsic layer parameters, Lecture Notes in Engineering and Computer Science, 2014.
- * Kacha, K., Djeffal, F., Ferhati, H., Bencherif, H., Bentrchia, T., Investigation of GaAs/Si solar cell with interfacial defects using ANFIS technique, 16th International Conference on Sciences and Techniques of Automatic Control and Computer Engineering, STA 2015.
- * Bencherif, H., Djeffal, F., Kacha, K., Arar, D., Analytical investigation of SiGe solar cell including texture morphology effects, 4th International Conference on Systems and Control, ICSC 2015.
- * Ferhati, H., Djeffal, F., Kacha, K., Arar, D., High efficiency amorphous triple-junction thin-film SiGe solar cells incorporating multi-trench region, 4th International Conference on Systems and Control, ICSC 2015.
- * Kacha, K., Djeffal, F., Ferhati, H., Benkouider, A., Berbezier, I., Multi-trench-based technique to improve amorphous SiGe thin-film solar cell performance, 15th International Conference on Sciences and Techniques of Automatic Control and Computer Engineering STA 2014.
- * Kacha, K., Djeffal, F., Bentrchia, T., Meguellati, M., Equivalent circuit modeling of SiGe/Si solar cell including interfacial defect effects, 14th International Conference on Sciences and Techniques of Automatic Control and Computer Engineering, STA 2013