

## 1. introduction

Dans ce chapitre, nous présentons l'étude de la cellule solaire à bas de Nano fils, la structure étudiée est : **Si/Nano fils-Si Cristallin**. Nous commençons, dans un premier temps, par définir la structure de cellule solaire à nano fil de Si et les paramètres utilisés dans notre étude et nous nous focalisons sur les nano fils de silicium comme couche absorbteur dans une cellule photovoltaïque. Ainsi nous excluons les cellules solaires dans lesquelles la jonction électrique est réalisée entre les nano fils et le substrat, Dans une seconde phase nous décrivons l'étude de l'approche théorique des propriétés optiques de nano fil. Dans notre simulation nous avons fait un petit travail qui varier le nombre de paramètres dans le structures d'étude.

## 2. Cellule solaire à nanofils de silicium

Dans cette partie, nous détaillerons le protocole de fabrication de la cellule solaire à nano fils. Les performances photovoltaïques seront ensuite mesurées et interprétées.

La structure finale de la cellule solaire a nano fils est illustrée sur le schéma de la figure III.1 la prise de contact est réalisée grâce a une grille métallique. Une partie de cette grille est déposée sur une zone sans nano fil afin d'éviter de les endommager avec la pointe de mesure.

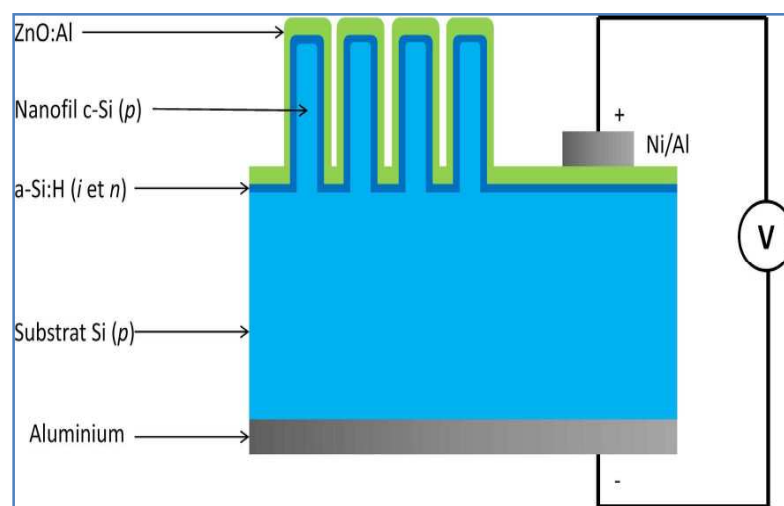


Figure III 1 – Schéma de la cellule solaire à nano fils. Les différentes couches ne sont pas à l'échelle [61].

## 3. Protocole de fabrication

### 3.1. Préparation du substrat

1. Le substrat de croissance est une plaquette de silicium cristallin, de résistivité à 6-12  $\Omega\text{cm}$  et d'épaisseur 550  $\mu\text{m}$ . Une oxydation en voie sèche est réalisée de manière à obtenir une épaisseur d'oxyde de 80 nm. Une résine photosensible est ensuite déposée sur la plaquette. L'insolation est réalisée à l'aide d'un stepper automatique. Le motif est composé d'un réseau carré de ronds de 400 nm de diamètre et d'une période de 800 nm. La résine insolée est développée par voie chimique. Les étapes citées précédemment ont été réalisées au CEA léti [61].

2. La plaquette de silicium est découpée par clivage mécanique en échantillons carrés d'environ 2 cm de côté.
3. Le dépôt du catalyseur est réalisé comme: l'oxyde de silicium est d'abord gravé dans une solution de HF diluée. Une épaisseur de 65 nm de cuivre est ensuite déposée dans un bâti d'évaporation à canon à électrons. Cette épaisseur permet d'obtenir des nano fils de diamètre d'environ 300 nm.
4. Pour le lift-off., l'échantillon est laissé à tremper dans l'acétone pendant 10 minutes sans agitation, puis pendant 10 minutes sous ultra-sons. Le rinçage s'effectue dans de l'iso propane sous ultra-sons pendant 10 minutes. Les échantillons sont enfin rincés à l'eau distillée et séchés sous un flux d'azote [61].

### 3.2. Croissance de l'assemblée de nano fils

Les paramètres de croissance que nous avons choisis sont ceux qui permettent d'obtenir des nano fils dopés avec une grande proportion de nano fils à orientation verticale. La hauteur des nano fils visés est d'environ 1.5  $\mu$  m. Les paramètres de croissance sont les suivants : pression totale dans la chambre de 20 Torr, flux de silane de 10 sccm, flux de HCl de 70 sccm, flux de  $B_2H_6$  concentré à 8% dans l'hydrogène de 10 sccm. La température de croissance est 800°C. Le temps de croissance est fixé à 5 minutes. Le dopage vise est d'environ.  $5 \times 10^{17} cm^{-3}$  [61].

### 3.3. Nettoyage du catalyseur

Le nettoyage du catalyseur est réalisé en voie chimique par une succession de bains :

- gravure dans une solution d'HF 40 % pendant 10 minutes
- eau régale pendant 10 minutes
- HF 40% pendant 10 minutes
- solution commerciale « chrome etch » pendant 10 minutes.

L'échantillon est ensuite rincé à l'eau distillée et sèche sous un flux d'azote [61].

### 3.4. Création de la jonction

La jonction est créée par un dépôt de a-Si:H intrinsèque et de type n. Avant l'introduction dans la chambre de dépôt PE-CVD, l'échantillon subit une gravure à l'acide fluorhydrique dilué pour graver l'oxyde natif des flancs des nano fils. Les paramètres du dépôt PE-CVD sont ajustés pour que la conformité des dépôts soit maximale et qu'une épaisseur minimale d'environ 20 nm soit déposée sur les flancs et entre les nano fils au niveau du substrat. Pour cela, le temps de dépôt de la couche de a-Si:H intrinsèque est fixé pour obtenir une épaisseur nominale sur substrat plan de 50 nm. De même, l'épaisseur de la couche n est fixée à une épaisseur nominale sur substrat plan de 25 nm. Le dopage de la couche dopée n est d'environ  $5 * 10^{19} cm^{-3}$  [61].

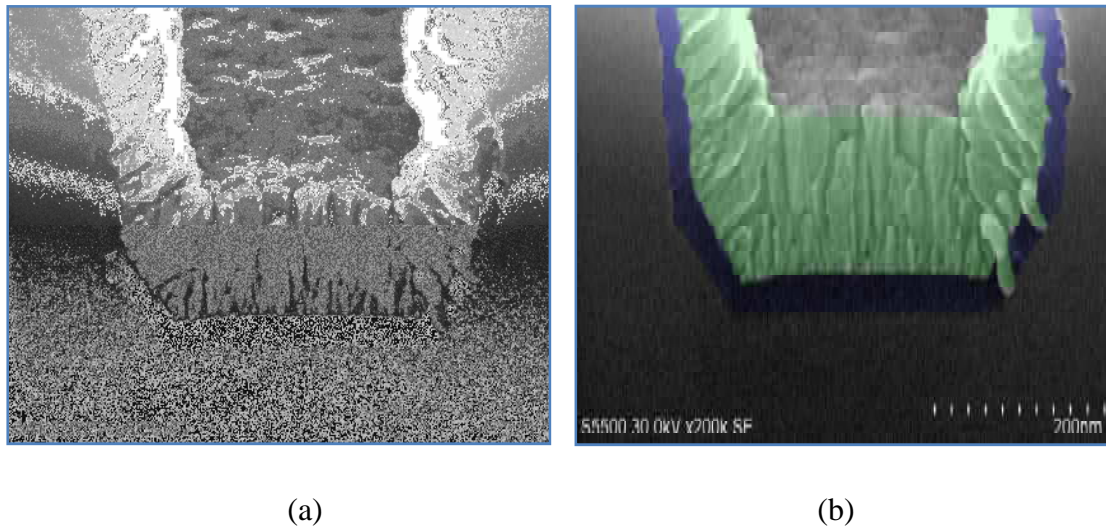
### 3.5 Oxyde transparent conducteur

Un oxyde transparent conducteur est ensuite déposé sur les nano fils de façon conforme. Cette couche doit être couvrante afin d'assurer une continuité électrique sur toute la surface des nano fils et de l'espace entre les nano fils. Le matériau choisi est l'oxyde de zinc dopé à l'aluminium (ZnO:Al). Nous visons une épaisseur nominale sur substrat plan de 365 nm ce qui correspond à une épaisseur sur les flancs des nano fils d'environ 100-200 nm. La résistivité du ZnO:Al est de  $1.2 * 10^{-3} \Omega\text{cm}$  [61].

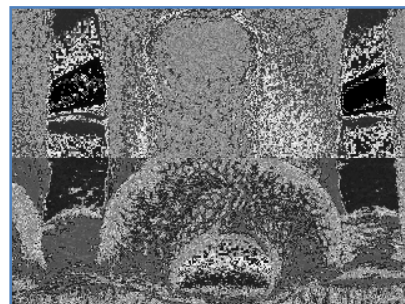
Une image MEB des couches de a-Si:H et de ZnO:Al après dépôt sur les nano fils est présentée sur la figure III.2.

Les épaisseurs des couches a-Si:H et ZnO:Al peuvent varier fortement suivant la morphologie des nano fils. En effet, lorsque les nano fils ne sont pas verticaux, l'épaisseur déposée sur les flancs et sur la partie plane sous les nano fils sera réduite à cause des effets d'ombrage.

Un exemple de ce phénomène est illustré sur la figure III.3.



**Figure III.2** – Images MEB d'une cellule à nano fils avec les couches de a-Si:H et de ZnO:Al déposées. La vue est centrée entre deux nano fils adjacents. **(a)** Image originale et **(b)** utilisation de couleurs pour faire apparaître les différentes couches (a-Si:H en bleu et ZnO:Al en vert) [61]



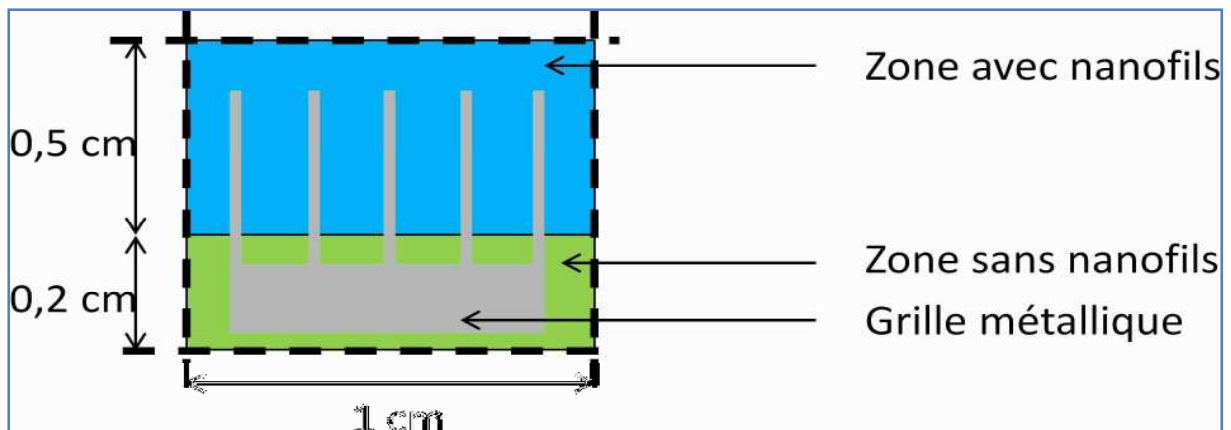
**Figure III.3** – Image MEB d'une cellule à nano fils qui montre la variation d'épaisseur du ZnO:Al en fonction de la morphologie des nano fils. Sur cette image, on peut voir un nano fil issu de la rencontre de deux nano fils adjacents dont les directions de croissance n'étaient pas verticales ce qui a provoqué leur rencontre et la croissance d'un seul nano fil. L'épaisseur de ZnO:Al sous ce nano fil est fortement réduite par effet d'ombrage [61].

### 3.6. Contacts électriques

La face arrière est ensuite recouverte d'une couche mince d'aluminium de 150 nm d'épaisseur. Pour la face avant une grille métallique de collecte est déposée sur les nano fils et sur la partie sans nano fils selon le schéma de la figure III.4. La grille est composée d'une bicouche de nickel et d'aluminium ayant pour épaisseur respective 50 et 500 nm.

La grille métallique est déposée de telle sorte que le bus de la grille soit sur la zone sans nano fils et que les doigts de la grille (d'une largeur de 100  $\mu\text{m}$ ) soient sur les nano fils.

Ainsi, l'ombrage de la grille est majoritairement sur la partie sans nano fils. Cela nous permet d'obtenir une réponse photovoltaïque qui provient en plus grande proportion de la zone avec nano fils par rapport à la zone sans nano fils. La surface totale de la cellule est de 0.7cm<sup>2</sup> (voir figure III.4) [61].



**Figure III.4** – Schéma de la cellule solaire à nano fil vue de haut, avec la grille métallique en couleur grise [61].

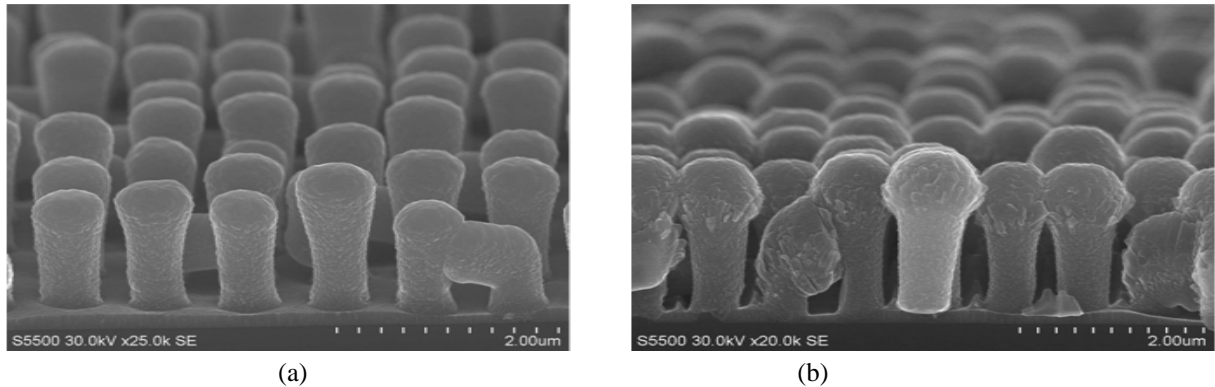
### 3.7. Isolation électrique

L'isolation des cellules s'effectue à l'aide d'un scribe mécanique qui permet de choisir avec précision la position des traits d'isolation. Cette méthode permet une grande répétabilité de l'isolation de la cellule. Les traits d'isolation sont visibles en pointillés sur le schéma de la figure III.4 [61].

## 4. Résultats photovoltaïques

### 4.1. Images MEB

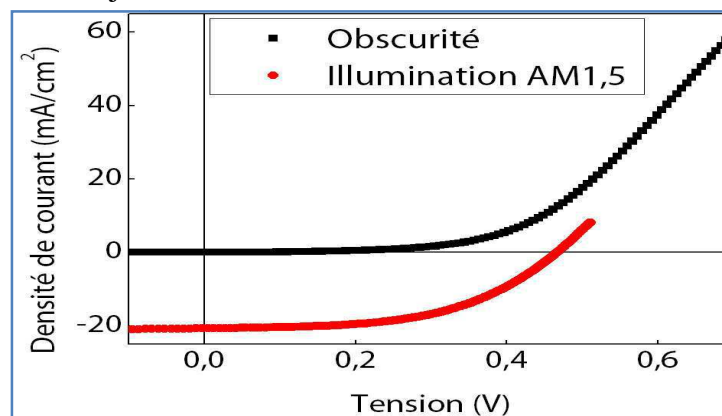
Une image MEB de la cellule ainsi réalisée est présentée sur la figure III.5. La couche de métal est continue au sommet des fils ; elle permet ainsi de diminuer la résistance série associée au transport de charge dans le ZnO:Al. La partie haute des nano fils est plus large du fait des dépôts successifs qui sont directs [61].



**Figure III.5** – Images SEM de la cellule finale sur (a) une zone sans grille et (b) sur une zone correspondant à un doigt de la grille métallique. Dans les zones sans électrode métallique, les nano fils sont connectés électriquement entre eux par le ZnO:Al ; les sommets des nano fils situés sous l'électrode métallique sont connectés électriquement entre eux par le métal [61].

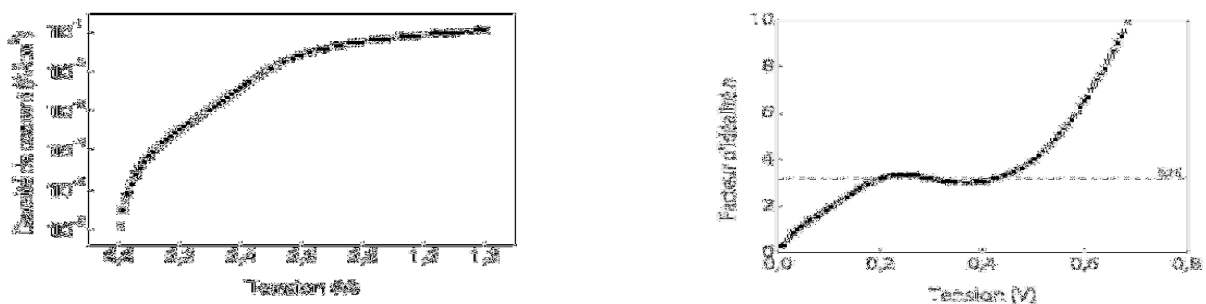
#### 4.2. Mesures électriques

Les mesures de courant-tension dans l'obscurité et sous illumination dans un simulateur solaire sont présentées sur la figure III.6. La caractéristique de diode est présente ce qui confirme la formation de la jonction.



**Figure III.6** – Caractéristique courant-tension de la cellule à nano fils [61].

Les analyses de la courbe sous obscurité (figure III.7) ont permis de déterminer les valeurs des résistances séries et parallèles. Le tableau 3.7 récapitule les performances de la cellule solaire à nano fils [61].



**Figure III.7** – (a) Caractéristique courant-tension de la cellule à nano fils sous obscurité et (b) facteur d'idéalité  $n$  associé.

$V_{co}$ (mV)	$J_{sc}$ ( $\frac{mA}{cm^2}$ )	FF (%)	rendement (%)	$R_s$ ( $\Omega cm^2$ )	$R_p$ ( $\Omega cm^2$ )	n	$J_{oo}$ ( $\frac{A}{cm^2}$ )
474	21.6	52.6	5.06	7.28	$2.59*10^3$	3.15	$3*10^{-5}$

**Table III.1** – Résultats électriques de la cellule solaire à nano fils avec les différents paramètres extraits.

Dans notre dispositif, trois types de jonctions sont connectées en parallèle :

- la jonction radiale créée autour des nano fils ;
- la jonction plane située sur la zone sans nano fils ;
- la jonction plane située sur la zone entre les nano fils.

Ces trois jonctions sont en parallèle car elles sont soumises à la même tension. Le  $V_{co}$  total mesuré du dispositif sera donc supérieur ou égal au  $V_{co}$  minimum des trois jonctions. La jonction créée sur le substrat plan a été caractérisée sur un échantillon de contrôle sans nano fils. Cet échantillon a subi les mêmes procédés de dépôts que la cellule à nano fils. On peut donc considérer qu'il représente bien la zone sans nano fils. Son  $V_{co}$  mesuré est d'environ 690 mV.

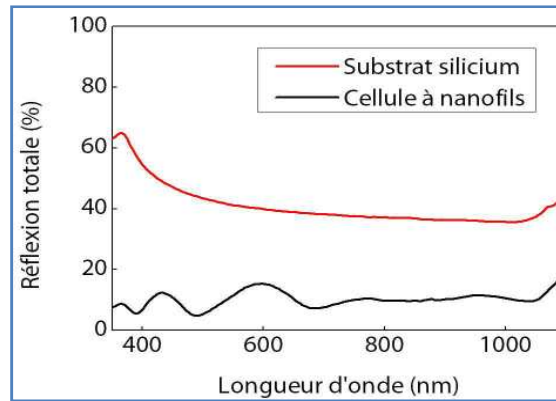
La jonction située sur la zone plane entre les nano fils peut être considérée comme similaire à la jonction plane sans nano fil (la seule différence étant l'épaisseur des couches de a-Si:H et de ZnO:Al). C'est donc la jonction située sur les nano fils qui impose un  $V_{co}$  de 497 mV à la cellule finale. Cette valeur est une borne supérieure du  $V_{co}$  effectif de la jonction des nano fils.

La réduction par rapport à la partie plane de l'ordre de 220 mV indique un taux élevé de recombinaisons dans les nano fils (à l'interface entre le silicium cristallin et le a-Si:H ou dans le fil cristallin). La valeur du  $V_{co}$  de notre dispositif est comparable aux meilleures cellules à nano fils de la littérature obtenues par croissance catalysée.

La valeur du facteur d'idéalité n est élevée ce qui indique de fortes recombinaisons dans la cellule et des pertes liées à de fortes résistances parasites. Le courant photo généré est comparable à la valeur obtenue par le groupe d'IBM ( $18 mA cm^{-2}$ ) pour une jonction créée par un dépôt de couche mince [62]. La résistance série est supérieure aux valeurs optimales (environ  $1 \Omega cm^2$ ), ce qui entraîne la baisse du facteur de forme à une valeur de 52.6 %, qui reste néanmoins supérieure aux deux valeurs de la littérature des jonctions créées par dépôt de couches minces (37 % pour l'équipe d'IBM [62] et 28 % pour l'équipe de General Electric [63]).

Le rendement de conversion est prometteur et dépasse les valeurs de la littérature à l'exception des travaux de Caltech sur des nano fils de tailles micrométriques avec une jonction créée par diffusion.

La mesure de réflexion de la cellule est présentée sur la figure 3.6. On peut remarquer des oscillations qui peuvent provenir des interférences dans les couches de ZnO:Al sur la partie plane entre les nano fils. Les valeurs de réflexion restent relativement basses (environ 10 %) pour toute la gamme de longueurs d'ondes utiles pour la conversion photovoltaïque ce qui indique une bonne absorption de la lumière dans le dispositif.



**Figure III.8** – Mesures de réflectivité de la cellule à nano fils comparée à un substrat de silicium.

Grace a cette mesure, on peut calculer le rendement quantique interne (IQE pour internal Quantum efficiency), qui détermine la fraction d'électrons collectes par rapport au nombre d'électrons photo générés (ou de photons absorbés par la cellule). Le rendement quantique interne est défini par la formule suivante :

$$IQE(\lambda) = \frac{IQE(\lambda)}{Absorption\ optique(\lambda)} = \frac{IQE(\lambda)}{1-R(\lambda)} \quad (III.1)$$

Avec  $R(\lambda)$  la réflexion totale et EQE le rendement quantique externe.

Les rendements quantiques externe et interne sont tracés sur la figure III.9 page ci-contre.

La caractéristique de l'IQE n'est pas optimale puisque les valeurs sont inférieures à 100 %. Un pic de conversion se situe à la longueur d'onde 750 nm avec une valeur de 92 %. L'absorption des photons dans les couches de ZnO:Al et de a-Si:H induit une faible collecte des porteurs aux faibles longueurs d'ondes. La perte aux grandes longueurs d'ondes est due aux recombinaisons en face arrière du substrat à l'interface avec le contact aluminium. Un moyen de diminuer ces recombinaisons en face arrière serait d'introduire une couche passivante de a-Si:H et de déposer une couche d'oxyde transparent pour prendre le contact (c'est la technologie qu'utilise actuellement Sanyo).

### 4.3. Mesures EBIC

Les mesures de rendement quantique sur les couches planes permettent d'estimer l'efficacité de la collecte en fonction de la profondeur sondée. Sur la cellule a nano fils, du fait de sa structure particulière on ne peut pas remonter a ces informations (à l'exception des très faibles et très grandes longueurs d'ondes) : le spot d'illumination lors de la mesure EQE illumine les nano fils et les zones planes entre les nano fils.

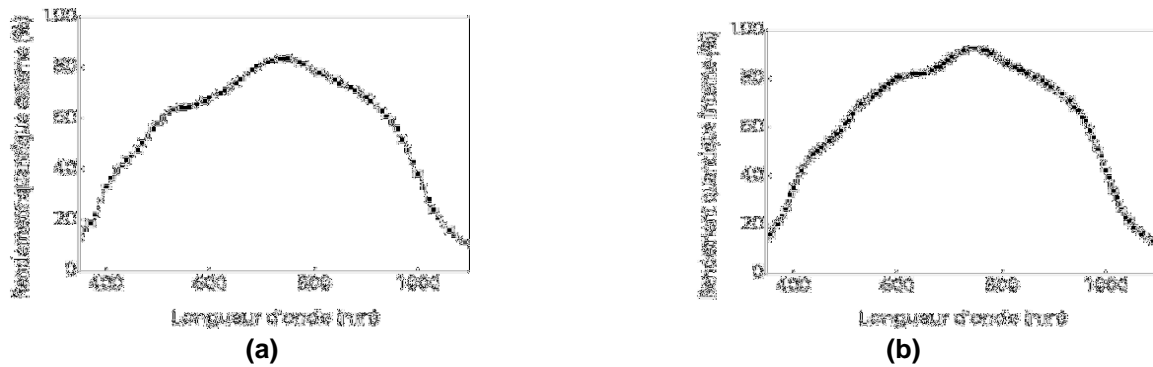


Figure III.9 – Mesure de rendement quantique (a) externe et (b) interne de la cellule à nano fils [62].

## 5. Etudes des propriétés optiques et électriques de nano fil de silicium

### 5.1. Etudes théorique des propriétés optiques de nano fil

La théorie de Mie est une solution analytique exacte des équations de Maxwell originellement formulée pour le problème de la diffusion de la lumière d'une onde plane par une sphère.

Des solutions existent pour d'autres formes géométriques régulières comme le cylindre.

Le nanofil est modélisé par un cylindre de rayon  $a$  et de longueur infinie, il est considéré homogène, linéaire et isotrope, et entouré par un milieu environnant homogène et non-absorbant. Le milieu environnant et le matériau constituant le nanofil sont considérés non-magnétiques ( $\mu_1 = \mu_2 = 1$ ).

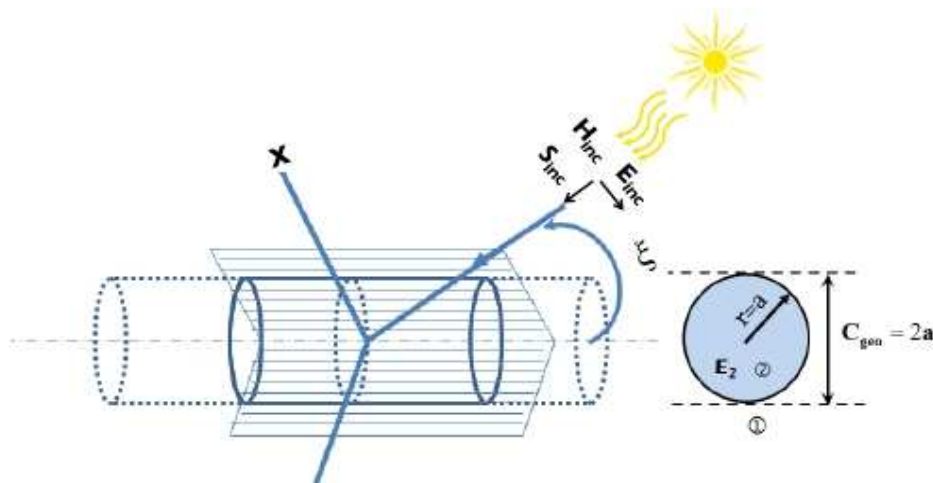


Figure III.10 – Diffusion de la lumière par un fil de longueur infinie[60].

Le plan d'incidence est défini par le vecteur d'onde incident  $\mathbf{k}_1$  et l'axe du nano fil  $\mathbf{z}$ ,  $\xi$  étant l'angle d'incidence.

Les équations de Maxwell se réduisent à l'équation d'onde vectorielle d'Helmholtz :

$$\Delta\{\mathbf{E}, \mathbf{H}\} + k^2\{\mathbf{E}, \mathbf{H}\} = \mathbf{0} \quad (\text{III.2})$$



La résolution, dans le cadre de la théorie de Lorenz-Mie, commence par le développement des différents champs électromagnétiques (EM)  $\{\mathbf{E}, \mathbf{H}\}$  en vecteurs harmoniques cylindriques  $\mathbf{M}_n$  et  $\mathbf{N}_n$  définis par :

$$\mathbf{M}_n = \nabla \times (u_z \psi_n) \text{ et } \mathbf{N}_n = \frac{\nabla \times \mathbf{M}_n}{k} \quad (\text{III.3})$$

Où  $\psi_n$  est une solution de l'équation d'onde scalaire obtenue par la méthode de séparation des variables :

$$\psi_n(r, \theta, z) = R_n(r) e^{in\theta} e^{ik \cos \xi z} \quad (\text{III.4})$$

Avec  $R_n(r)$  solution de l'équation différentielle radiale de Bessel, pour les champs incidents  $\{\mathbf{E}_{\text{inc}}, \mathbf{H}_{\text{inc}}\}$ ,  $R_n(r)$  est choisie égale à  $J_n(r)$  la fonction de Bessel de première espèce.

Pour les champs internes ( $r < a$ )  $\{\mathbf{E}_2, \mathbf{H}_2\}$ ,  $R_n(r)$  est égale aussi à  $J_n(r)$  car elle est définie en 0.

Dans le cas des champs diffusés  $\{\mathbf{E}_{\text{sca}}, \mathbf{H}_{\text{sca}}\}$ ,  $R_n(r)$  doit être égale à la fonction de Hankel de premier type  $H_n^{(1)} = J_n(r) + i Y_n(r)$  car cette fonction a une forme asymptotique quand ( $r \gg a$ ) correspondant à une onde progressive se propageant dans le sens des  $r$  croissants ( $\alpha e^{i(kr - \omega t)}$ ) [60].

Ceci est vrai lorsque le facteur temporel employé est  $e^{-i\omega t}$ . Dans le cas contraire ou le facteur temporel employé est  $e^{i\omega t}$ ,  $R_n(r)$  doit être égale à la fonction de Hankel de deuxième type  $H_n^{(2)} = J_n(r) - i Y_n(r)$

Les champs externes ( $r > a$ )  $\{\mathbf{E}_1, \mathbf{H}_1\}$  correspondent à la somme des champs incidents et des champs diffusés :

$$\{\mathbf{E}_1, \mathbf{H}_1\} = \{\mathbf{E}_{\text{inc}}, \mathbf{H}_{\text{inc}}\} + \{\mathbf{E}_{\text{sca}}, \mathbf{H}_{\text{sca}}\} \quad (\text{III.5})$$

Les coefficients de développement des champs  $\{\mathbf{E}_{\text{sca}}, \mathbf{H}_{\text{sca}}\}$  et  $\{\mathbf{E}_2, \mathbf{H}_2\}$  sont déterminés à partir des relations de continuité des composantes tangentes des champs  $\{\mathbf{E}_2, \mathbf{H}_2\}$  et  $\{\mathbf{E}_1, \mathbf{H}_1\}$  à l'interface nano fil/milieu environnant ( $r = a$ ). Ces relations de continuité sont des conditions suffisantes pour satisfaire la condition de conservation d'énergie [60].

La réponse optique en champ lointain d'un nano fil individuel, c'est-à-dire à une distance  $r$  par rapport au nano fil très supérieure au rayon du nano fil  $a$ , est exprimée souvent par des grandeurs sans dimension exprimant la capacité du nano fil à atténuer. À diffuser ou à absorber la lumière incidente. Ces grandeurs sont respectivement l'efficacité d'extinction  $Q_{ext}$ , l'efficacité de diffusion  $Q_{sca}$  et l'efficacité d'absorption  $Q_{abs}$  l'efficacité  $Q_i$  est le rapport entre la section efficace  $C_i$  et la section géométrique du nano fil  $C_{geo}$ .

$$Q_i = \frac{C_i}{C_{geo}}, i = \text{ext, sca, abs} \quad (\text{III.6})$$

Les sections efficaces  $C_i$  sont reliées entre elle comme suit :

$$C_{ext} = C_{abs} + C_{sca} \quad (\text{III.7})$$

Les sections efficaces ont la dimension d'une surface par unité de longueur (la longueur du nano fil est infinie). Il est en de même pour la section géométrique du nano fil qui est égale à  $D=2a$  ; l'aire de la projection de la surface latérale sur un plan qui lui est parallèle [60].

La section efficace de diffusion  $C_{sca}$  élastique s'exprime comme :

$$C_{sca} = \frac{W_{sca}}{I_{inc}} \quad (\text{III.8})$$

Telle que  $I_{inc}$  est l'irradiance incidente (puissance par unité de surface) qui est égale à la valeur moyenne temporelle du vecteur de poynting incident  $S_{inc}$  :

$$I_{inc} = \langle S_{inc} \rangle_t = \langle \mathbf{E}_{inc} \times \mathbf{H}_{inc} \rangle_t = \frac{1}{2} \text{Re} \{ \mathbf{E}_{inc} \times \mathbf{H}_{inc}^* \} \quad (\text{III.9})$$

Et  $W_{sca}$  est la puissance diffusée par unité de longueur :

$$W_{sca} = \frac{1}{L} \int_A \langle S_{sca} \rangle_t \widehat{U}_r dA \quad (\text{III.10})$$

Ou  $A$  est la surface latérale d'intégration du cylindre fictif de rayon  $R$  ( $R \gg a$ ) et de longueur  $L$ , et  $S_{sca}$  est le vecteur de poynting dont la valeur moyenne temporelle est  $\frac{1}{2} \text{Re} \{ \mathbf{E}_{inc} \times \mathbf{H}_{inc}^* \}$ .

La section efficace d'extinction  $C$  a pour expression :

$$C_{ext} = \frac{W_{ext}}{I_{inc}} \quad (\text{III.11})$$

Ou  $W_{ext}$  est la puissance dissipée par diffusion et absorption par unité de longueur :

$$W_{ext} = -\frac{1}{L} \int_A \langle S_{ext} \rangle_t \widehat{U}_r dA \quad (\text{III.12})$$

$\mathbf{S}_{ext}$  étant le vecteur de poynting défini par :

$$\mathbf{S}_{ext} = \mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_{inc} - \mathbf{S}_{sca}. \quad (\text{III.13})$$

En tenant compte de (II.4), le vecteur de poynting externe  $\mathbf{S}_1$  est donné par :

$$\mathbf{S}_1 = \mathbf{E}_1 \times \mathbf{H}_1 = (\mathbf{E}_{inc} + \mathbf{E}_{sca}) \times (\mathbf{H}_{inc} + \mathbf{H}_{sca}) \quad (\text{III.14})$$

$$\begin{aligned} &= \mathbf{E}_{inc} \times \mathbf{H}_{inc} + (\mathbf{E}_{sca} \times \mathbf{H}_{sca}) + (\mathbf{E}_{inc} \times \mathbf{H}_{sca}) + \mathbf{E}_{sca} \times \mathbf{H}_{inc} \\ &= \mathbf{S}_{inc} + \mathbf{S}_{sca} + (\mathbf{E}_{inc} \times \mathbf{H}_{sca}) + \mathbf{E}_{sca} \times \mathbf{H}_{inc} \end{aligned} \quad (\text{III.15})$$

La valeur temporelle moyenne de  $\mathbf{S}_{ext}$  est alors :

$$\langle \mathbf{S}_{ext} \rangle_t = \langle (\mathbf{E}_{inc} \times \mathbf{H}_{sca}) + \mathbf{E}_{sca} \times \mathbf{H}_{inc} \rangle_t \quad (\text{III.16})$$

$$= \frac{1}{2} \text{Re} \{ \mathbf{E}_{inc} \times \mathbf{H}_{sca}^* + \mathbf{E}_{sca} \times \mathbf{H}_{inc}^* \} \quad (\text{III.17})$$

Les formes asymptotiques en champ lointain des champs EM sont utilisées afin de déterminer les expressions analytiques des sections efficaces et ainsi des efficacités [60].

La réponse optique en champ lointain à un éclairage par une lumière non-polarisée (UP, unpolarized) est égale à la moyenne entre deux réponses optiques : une à un éclairage par une lumière polarisée en transverse magnétique (TM) et une autre à un éclairage par une lumière polarisée en transverse électrique (TE). Elle est alors décrite par des efficacités  $Q_i^{UP}$  définies par :

$$Q_i^{UP}(\lambda) = \frac{1}{2} [Q_i^{TM}(\lambda) + Q_i^{TE}(\lambda)]; i = ext, sca, abs \quad (\text{III.18})$$

La polarisation TM et la polarisation TE sont deux états de polarisation orthogonaux et se réfèrent respectivement à un champ électrique incident parallèle et perpendiculaire au plan d'incidence. L'égalité (II.15) provient du fait que le champ électrique incident dans le cas d'une lumière non polarisée peut être décomposé comme suit :

$$E_{inc} = E_{inc,\parallel} u_{\parallel} + E_{inc,\perp} u_{\perp} \quad (\text{III.19})$$

Ou  $E_{inc,\parallel}$  et  $E_{inc,\perp}$  sont respectivement les composantes parallèle et perpendiculaire du champ électrique incident par rapport au plan d'incidence. Le facteur  $\frac{1}{2}$  dans cette égalité est alors un facteur de normalisation [60].

Compte tenu des équations (II.6), (II.7), (II.8), (II.11), (II.12), (II.17), les efficacités  $Q_i$  sont fonction uniquement des coefficients de développement des champs diffusés. En effet, l'efficacité de diffusion  $Q_{sca}$  s'exprime comme :

$$Q_{sca}^{TM,TE} = \frac{1}{\Omega} \left[ |a_0^{TM,TE}|^2 + 2 \sum_{n=1}^{+\infty} \left( |a_n^{TM,TE}|^2 + |b_n^{TM,TE}|^2 \right) \right] \quad (\text{III.20})$$

Et l'efficacité d'extinction  $Q_{ext}$  est donnée par :

$$Q_{ext}^{TM,TE} = \frac{2}{\Omega} \text{Re} \left[ a_0^{TM,TE} + 2 \sum_{n=1}^{+\infty} a_n^{TM,TE} \right] \quad (\text{III.21})$$

Où  $a_n$  et  $b_n$  sont les coefficients de développement des champs diffusés.

$\Omega = k_1 a = \frac{2\pi\eta_1}{\lambda} a$  est le paramètre de taille  $\eta_1$  avec est l'indice de réfraction du milieu environnant  $\lambda$  et la valeur de la longueur d'onde dans le vide. D'après (II.5) et (II.6), l'efficacité de diffusion  $Q_{sca}$  peut être déduite en utilisant la relation suivante :

$$Q_{abs}^{TM,TE} = Q_{ext}^{TM,TE} - Q_{sca}^{TM,TE} \quad (\text{III.22})$$

Nous reportons ici uniquement les expressions des coefficients des champs diffusés  $a_n^{TM}$  et  $b_n^{TM}$  dans le cas d'une lumière incidente polarisée en TM ( $\mathbf{E}_{inc,\parallel}$  plan d'incidence) sous incidence  $\xi$  quelconque :

$$a_n^{TM} = \frac{W_n B_n + i D_n C_n}{W_n V_n + i D_n^2} \quad (\text{III.23})$$

$$b_n^{TM} = \frac{C_n V_n - B_n D_n}{W_n V_n + i D_n^2} \quad (\text{III.24})$$

$$B_n = \beta [\eta^2 \beta J_n'(\gamma) J_n(\gamma) - \gamma J_n(\gamma) J_n'(\beta)] \quad (\text{III.25})$$

$$C_n = n \cos \varepsilon \gamma J_n(\gamma) J_n(\beta) \left( \frac{\beta^2}{\gamma^2} - 1 \right) \quad (\text{III.26})$$

$$D_n = n \cos \varepsilon \gamma J_n(\gamma) H_n^{(1)}(\beta) \left( \frac{\beta^2}{\gamma^2} - 1 \right) \quad (\text{III.27})$$

$$V_n = \beta \left[ \eta^2 \beta J_n'(\gamma) H_n^{(1)}(\beta) - \gamma J_n(\gamma) H_n^{(1)'}(\beta) \right] \quad (\text{III.28})$$

$$W_n = i\beta \left[ \gamma \beta J_n(\gamma) H_n^{(1)}(\beta) - \beta J_n'(\gamma) H_n^{(1)'}(\beta) \right]. \quad (\text{III.29})$$

$\eta = \frac{\eta_2}{\eta_1}$  est l'indice de réfraction complexe relatif du nanofil par rapport à celui du milieu environnant

$\eta_1, \beta = \Omega \sin \varepsilon$ ,  $\gamma = \Omega \sqrt{\eta^2 - \cos^2 \varepsilon}$  et  $J_n'$  et  $H_n^{(1)'}$  sont respectivement les dérivées du premier ordre des fonctions  $J_n$  et  $H_n^{(1)}$  par rapport à leurs arguments.

Dans le cas d'une incidence normale (i.e.  $\xi=90^\circ$ ) le vecteur d'onde incident est perpendiculaire à l'axe du nanofil. Une polarisation TM désigne ainsi le cas d'un champ électrique incident perpendiculaire à l'axe du nanofil. En incidence normale, les paramètres  $C_n$ , et  $D_n$ , deviennent nuls. Ceci implique que le coefficient de développement du champ diffusé  $b_n^{TM}=0$  et le coefficient  $a_n^{TM}$  devient :

$$a_n^{TM} \frac{B_n}{V_n} = \frac{\eta J_n'(k_2 a) J_n(k_1 a) - J_n(k_2 a) J_n'(k_1 a)}{\eta J_n'(k_2 a) H_n^{(1)}(k_1 a) - J_n(k_2 a) H_n^{(1)'}(k_1 a)} \quad (\text{III.30})$$

On donne l'expression du coefficient de développement des champs diffusés en polarisation TE  $a_n^{TE}$  :

$$a_n^{TE} = \frac{J_n'(k_2 a) J_n(k_1 a) - \eta J_n(k_2 a) J_n'(k_1 a)}{J_n'(k_2 a) H_n^{(1)}(k_1 a) - \eta J_n(k_2 a) H_n^{(1)'}(k_1 a)} \quad (\text{III.31})$$

Les expressions de l'expressions de l'efficacité de diffusion (II.17) et de l'efficacité d'absorption (II.19), en incidence normale, se réduisent à :

$$Q_{sca}^{TM,TE} = \frac{2}{\Omega} \left[ |a_0^{TM,TE}|^2 + 2 \sum_{n=1}^{+\infty} (|a_n^{TM,TE}|^2) \right] \quad (\text{III.32})$$

$$Q_{sca}^{TM,TE} = \frac{2}{\Omega} \text{Re} \{ a_0^{TM,TE} + 2 \sum_{n=1}^{+\infty} a_n^{TM,TE} \} - Q_{sca}^{TM,TE} \quad (\text{III.31})$$

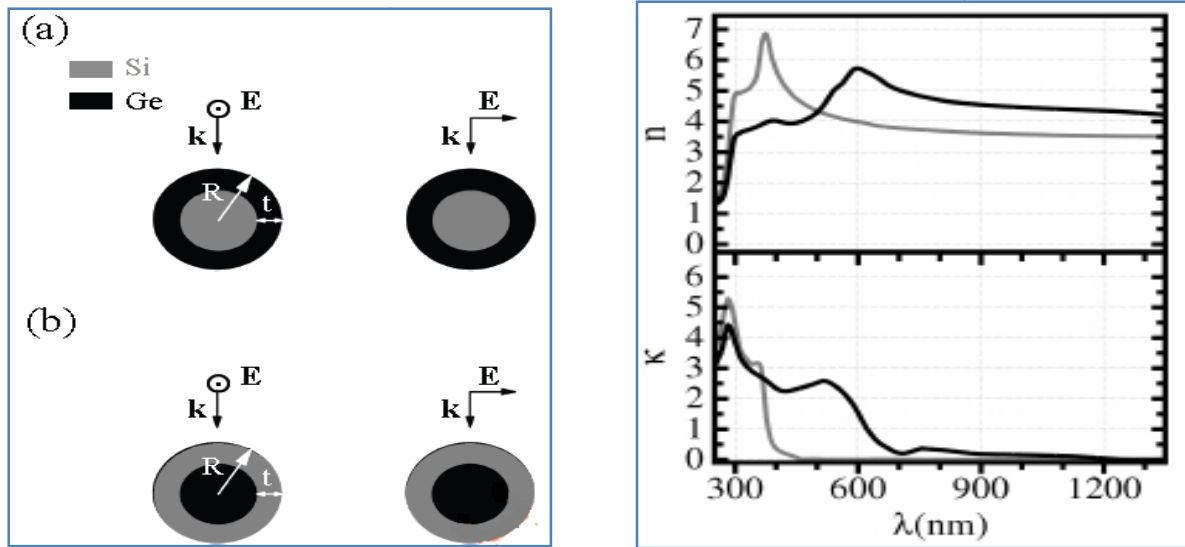
## 5.2. Approche théorique

Les calculs de la réponse optique sont effectués dans le cadre de la théorie de Lorenz-Mie. La vue en coupe de la géométrie du problème étudié est représentée sur les III.2 (a) et III.2 (b).

Le nanofil cœur/gaine est modélisé par un cylindre coaxial de longueur infinie de rayon externe  $R$ , de gaine d'épaisseur  $t$  et de rayon interne  $R-t$ .

Le nano fil est considéré suspendu dans le vide et est éclairé par une onde plane dont vecteur d'onde est perpendiculaire à l'axe du nanofil. La réponse optique en champ lointain, comme dans le cas d'un nano fil simple, est caractérisée par l'efficacité de diffusion  $Q_{sca}$  et l'efficacité d'absorption  $Q_{abs}$ .

Ces quantités sont obtenues à l'issue de la résolution de l'équation de Helmholtz. Par rapport au nanofil à structure simple, la structure cœur/gaine exige de définir les champs électromagnétiques



**Figure III.11** (a) Section transversale d'un nanofil coaxial de cœur Si et gaine Ge (Si/Ge) et (b) d'un nanofil coaxial de cœur Ge et gaine Si (Ge/Si). À gauche de (a) et (b) est présentée le cas d'une lumière incidente en polarisation TM et à droite de (a) et (b) le cas d'une lumière incidente en polarisation TE. (c) Partie réelle (indice de réfraction  $n$ ) et partie imaginaire (coefficient d'extinction  $\kappa$ ) de l'indice de réfraction complexe  $n$  de Si (courbes grises) et Ge (courbes noires) [60].

(EM) dans trois régions : champs incidents  $\{E_{inc}, H_{inc}\}$  : et champs diffusés  $\{E_{sca}, H_{sca}\}$  à l'extérieur du nanofil, champs  $\{E_2, H_2\}$  dans la gaine et champs  $\{E_3, H_3\}$  dans le cœur. Le champ EM total à l'extérieur du nano fil  $\{E_1, H_1\}$  est égal à la somme des champs incident et diffusé.

La solution exacte du problème s'articule sur le développement des champs EM en fonction des vecteurs harmoniques cylindriques  $M_n$ , et  $N_n$ . les vecteurs  $M_n$  et  $N_n$  sont définis par :

$$M_n = \begin{bmatrix} in \frac{R_n(K_r)}{K_r} \\ -R'_n(K_r) \\ 0 \end{bmatrix} e^{in\theta} \quad N_n = k \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ R_n(K_r) \end{bmatrix} e^{in\theta} \quad (III.32)$$

Ou  $R_n(K_r)$  sont les fonctions de Bessel appropriées et  $R'_n(K_r)$  sont les dérivées de premier ordre de ses fonctions par rapport à leurs arguments ( $K_r$ ).

Dans le cas d'une lumière incidente dont le champ électrique est parallèle à l'axe du nanofil (polarisation TM), ils sont exprimés comme suit dans les différentes régions :

$$\begin{cases} E_{inc} = E_0 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (-i)^n J_n(k_1 r) e^{in\theta} u_z \\ E_{sca} = E_0 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (-i)^n (-a_n) H_n^{(1)}(k_1 r) e^{in\theta} u_z \\ E_2 = E_0 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (-i)^n (b_n H_n^{(1)}(k_2 r) + c_n H_n^{(2)}(k_2 r)) e^{in\theta} u_z \\ E_3 = E_0 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (-i)^n d_n J_n(k_3 r) e^{in\theta} u_z \end{cases} \quad (III.33)$$

Ou  $a_n, b_n, c_n$ , et  $d_n$  sont les coefficients de développement et  $u_z$  correspond à l'axe du nano fil. Les expressions des champs magnétiques H sont déterminées directement à partir des expressions des

champs électriques en utilisant l'équation de Maxwell-faraday ( $\nabla \times E = iw\mu H$  pour un facteur temporel utilisé  $e^{-inw}$ ) soient :

$$\left\{ \begin{array}{l} H_{inc} = \frac{ik_1}{w\mu_1} E_0 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (-i)^n \begin{bmatrix} in \frac{J_n(K_1 r)}{K_1 r} \\ -J_n'(K_1 r) \\ 0 \end{bmatrix} e^{in\theta} \\ H_{sca} = \frac{ik_1}{w\mu_1} E_0 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (-i)^n (-a_n) \begin{bmatrix} in \frac{H_n^{(1)}(K_1 r)}{K_1 r} \\ -H_n^{(1)'}(K_1 r) \\ 0 \end{bmatrix} e^{in\theta} \\ H_2 = -\frac{ik_2}{w\mu_2} E_0 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (-i)^n \left( b_n \begin{bmatrix} in \frac{H_n^{(1)}(K_2 r)}{K_2 r} \\ -H_n^{(1)'}(K_2 r) \\ 0 \end{bmatrix} + c_n \begin{bmatrix} in \frac{H_n^{(2)}(K_2 r)}{K_2 r} \\ -H_n^{(2)'}(K_2 r) \\ 0 \end{bmatrix} \right) e^{in\theta} \\ H_3 = -\frac{ik_3}{w\mu_3} E_0 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (-i)^n (-d_n) \begin{bmatrix} in \frac{J_n(K_3 r)}{K_3 r} \\ -J_n'(K_3 r) \\ 0 \end{bmatrix} e^{in\theta} \end{array} \right. \quad (III.34)$$

Les coefficients de développement  $a_n, b_n, c_n$ , et  $d_n$  sont déterminés à partir des conditions aux interfaces qui imposent une continuité des composantes tangentielles des champs EM à l'interface vide-gaine ( $r=a$ ) ainsi qu'à l'interface cœur-gaine ( $r=b$ ) [60].

On obtient pour le coefficient du développement du champ diffusé,  $a$ , l'expression suivant :

$$a_n = \frac{\frac{k_2 J_n(k_1 a) A}{k_1} - \frac{\mu_2 J_n'(k_1 a) B}{\mu_1}}{\frac{k_2 H_n^{(1)}(k_1 a) A}{k_1} - \frac{\mu_2 H_n^{(1)'}(k_1 a) B}{\mu_1}} \quad (III.35)$$

$$\frac{B}{A} = \frac{H_n^{(1)'}(k_2 a) + P_n H_n^{(2)}(k_2 a)}{H_n^{(1)'}(k_2 a) + P_n H_n^{(2)'}(k_2 a)} \quad (III.36)$$

$$P_n = \frac{\frac{K_3 J_n'(k_3 b) H_n^{(1)}(k_2 b) - \mu_3 J_n(k_3 b) H_n^{(1)'}(k_2 b)}{K_2} - \frac{\mu_3 J_n(k_3 b) H_n^{(2)'}(k_2 b) - K_3 J_n'(k_3 b) H_n^{(2)}(k_2 b)}{\mu_2}}{\frac{\mu_3 J_n(k_3 b) H_n^{(2)'}(k_2 b) - K_3 J_n'(k_3 b) H_n^{(2)}(k_2 b)}{\mu_2} - \frac{K_3 J_n'(k_3 b) H_n^{(1)}(k_2 b) - \mu_3 J_n(k_3 b) H_n^{(1)'}(k_2 b)}{K_2}} \quad (III.37)$$

Ce coefficient  $a_n$  est obtenu pour une lumière incidente polarisée en TM. Pour déduire le coefficient  $a$  pour une lumière incidente polarisée en TE ( $E_{inc,\perp}$  à l'axe du nano fil), il suffit d'appliquer à la transformation de dualité suivante  $\varepsilon_i \rightarrow \mu_i, \mu_i \rightarrow \varepsilon_i, i = 1, 2, 3$  :

Les expressions des efficacités  $Q_{sca}$  et  $Q_{abs}$ , décrivant la réponse optique d'un nano fil à structure cœur/gaine, dans le cas d'une lumière incidente polarisée en TM et dans le cas d'une lumière incidente polarisée en TE sont identiques [60].

Dans le présente travail, le coefficient du développement du champ diffusé est noté a pour les deux cas de polarisation de la lumière incidente. Ainsi, les expressions des efficacités sont données par :

$$Q_{sca} = \frac{C_{sca}}{C_{geo}} \frac{1}{2R} \frac{4}{K_1} [|a_0|^2 + 2 \sum_{n=1}^{+\infty} |a_n|^2] \quad (III.38)$$

$$Q_{abs} = \frac{C_{abs}}{C_{geo}} \frac{1}{2R} \frac{4}{K_1} Re [a_0 + 2 \sum_{n=1}^{+\infty} a_n] - Q_{sca} \quad (III.39)$$

Ou  $C_{geo}=2R$  est la section géométrique du nanofil, et  $C_{sca}$  et  $C_{abs}$  sont respectivement les sections efficaces de diffusion et d'absorption.

La réponse optique en champ lointain d'un nanofil à un éclairage non-polarisé correspond à la moyenne entre la réponse calculée pour une lumière incidente polarisée en TM et celle pour une lumière incidente polarisée en TE.

Le formalisation décrit ci-dessus est appliqué pour calculer la réponse optique des nanofil individuels SiGe à structure cœur/gaine, soient les nanofils Ge/Si et Si/Ge.

### 5.3. Nanofils Ge/Si :

La variation de l'efficacité de diffusion  $Q_{sca}^{UP}$  et de l'efficacité d'absorption  $Q_{abs}^{UP}$  d'un nanofil individuel cœur/gaine Ge/Si en fonction du rayon externe R et de la longueur d'onde de l'onde incidente  $\lambda$  sont reportées sur fig.III12(a) sous forme de carte de couleur pour différentes valeurs de l'épaisseur de la gaine de Si [60].



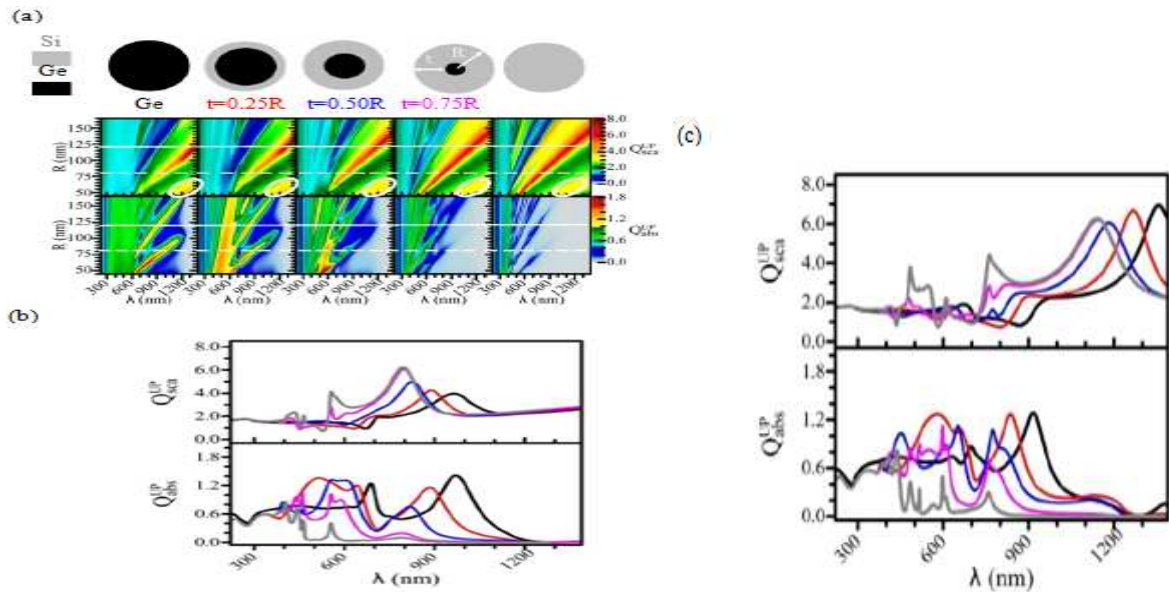
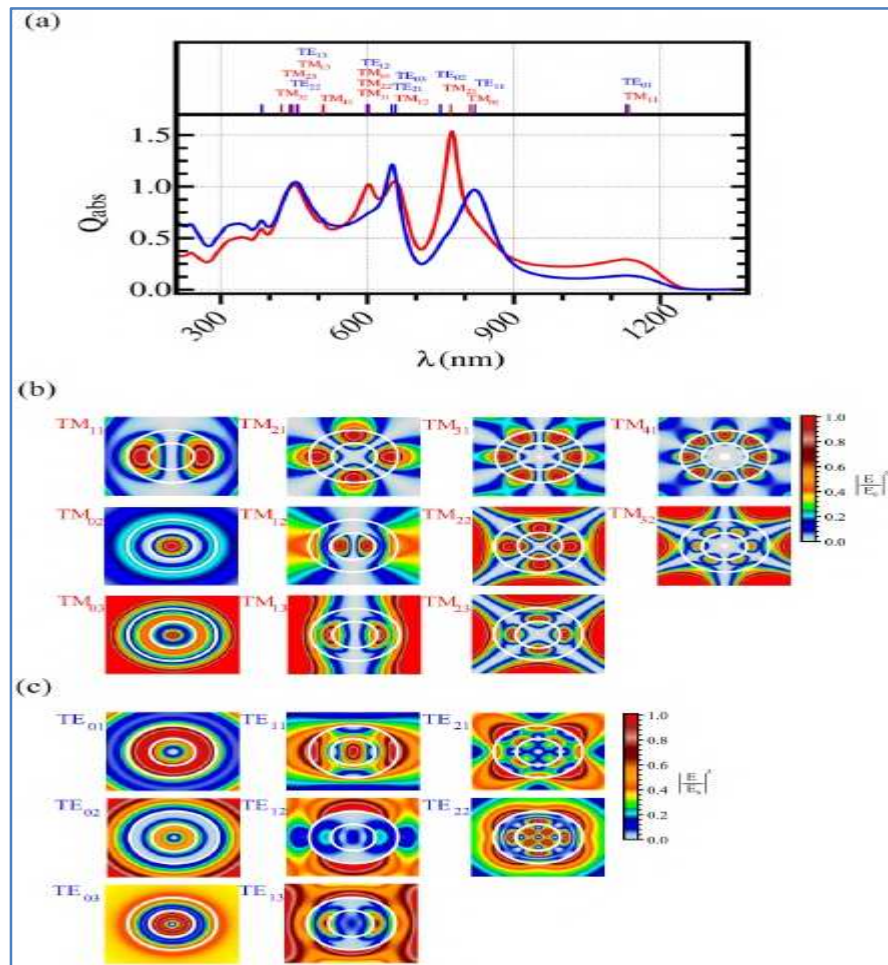


Figure III.12. (a) Efficacités d'absorption  $Q_{sca}^{UP}$  et  $Q_{abs}^{UP}$  de diffusion de la lumière d'un nano fil cœur/gaine Ge/Si suspendu dans le vide en fonction du rayon externe  $R$  et de la longueur d'onde incidente  $\lambda$  pour différentes valeurs  $t$  de l'épaisseur du gain Si. Spectres 1D  $Q_{sca}^{UP}$  et  $Q_{abs}^{UP}$  d'un nano fil Ge/Si calculés pour  $R=80$  nm (b) et  $R=120$  nm (c). La branche de résonance associée au mode  $TM_{01}$  est identifiée par une ellipse blanche sur chacune des cartes. Les couleurs des courbes spectrales sont associées aux différentes valeurs  $t$  telles qu'indiquées dans (a) [60].

Les cartes 2D montrées les figures III.12 (a) sont caractérisées par des branches d'efficacité d'absorption ou de diffusion relativement intenses. Les branches de résonance dans les cartes 2D d'un nano fil cœur/gaine, en particulier pour la diffusion, sont linéaires et quasi-parallèles entre elles.

Les branches de résonance, dans les cartes de la figures III.12 (a), sont associées à des modes de résonance ( $TM_{nl}$  et  $TE_{nl}$ ) dégénérés, à l'exception d'une seule branche celle liée au mode  $TM_{01}$  figures III.13 (a) montre la répartition spectrale des modes de résonance optique  $TM_{nl}/TE_{nl}$  liées à l'absorption d'un exemple de nano fil Ge/Si (couple bleu du bas de la figure III.12(c)). Les modes  $TM_{01}$  et  $TM_{11}$  se manifestent, en particulier, à la même longueur d'onde et sont isolés spectralement par rapport aux autres modes.

Les coefficients d'extinction  $K$  du silicium, constituant la gaine, devient très faible au delà de  $\lambda=400$  nm. Ce critère optique de la gaine permet au mode de résonance optique de se produire sur l'ensemble du volume du nano fil. Toute variation de l'épaisseur  $t$  de la gaine de Si favorise un déplacement significatif des positions spectrales des maxima, l'épaisseur  $t$  de la gaine de Si est inférieure à  $0.75R$ . Or, la variation de l'épaisseur  $t$  de la gaine de Si à rayon externe  $R$  constant correspond à la variation de la fraction  $x$  en Ge contenue dans le nano fil. Il en résulte que la fraction  $x$  représente, comme dans le cas des nano fils Si Ge à structure simple, un paramètre supplémentaire en plus du diamètre, pour ajuster les propriétés optiques des nano fil cœur/gaine Ge/Si.



**Figure III.13** – (a) Spectre d'efficacité d'absorption d'un nanofil cœur/gaine Ge/Si de rayon  $R=120$  nm et d'épaisseur  $t=0.5R$  dans le cas d'une lumière incidente polarisée en TM (courbe rouge) et dans le cas d'une lumière incidente polarisée en TE (courbe bleue), et les positions spectrales des modes  $TM_{n1}$  et  $TE_{n1}$ . Configuration de l'intensité du champ électrique dans la section transversale du fil pour les modes  $TM_{n1}$  (b) et les modes  $TE_{n1}$ (c). Les cercles en blanc font référence respectivement à l'interface cœur/gaine et à l'interface gaine/vide.

#### 5.4. Nanofil Si/Ge :

Dans cette section, nous examinons les propriétés optiques d'un nano fil individuel cœur/gaine Si/Ge figure III.14 comprend cartes 2D ( $\lambda, R$ ) de l'efficacité d'absorption et de l'efficacité de diffusion pour différentes valeurs  $t$  de l'épaisseur de la gaine de Ge.

Comme précédemment, les cartes ( $\lambda, R$ ) se caractérisent aussi par des branches de résonance. Les figures III.14 (b) et (c) présentent la réponse optique des nano fils Si/Ge avec un rayon externe  $R$  de 80 et 120 nm respectivement. Les maxima de la réponse optique des nano fils Si/Ge ( $t \geq 0.25R$ ) ont pratiquement les mêmes des positions spectrales que les maxima de réponse optique d'un nano fil à structure simple de Ge pur. La similitude entre la réponse optique cœur/gaine Si/Ge et celle du nano fil à structure simple de Ge pur directement au coefficient d'extinction  $k$  élevé du germanium, matériau de la gaine. La lumière ne voit pas le cœur de Si [60].

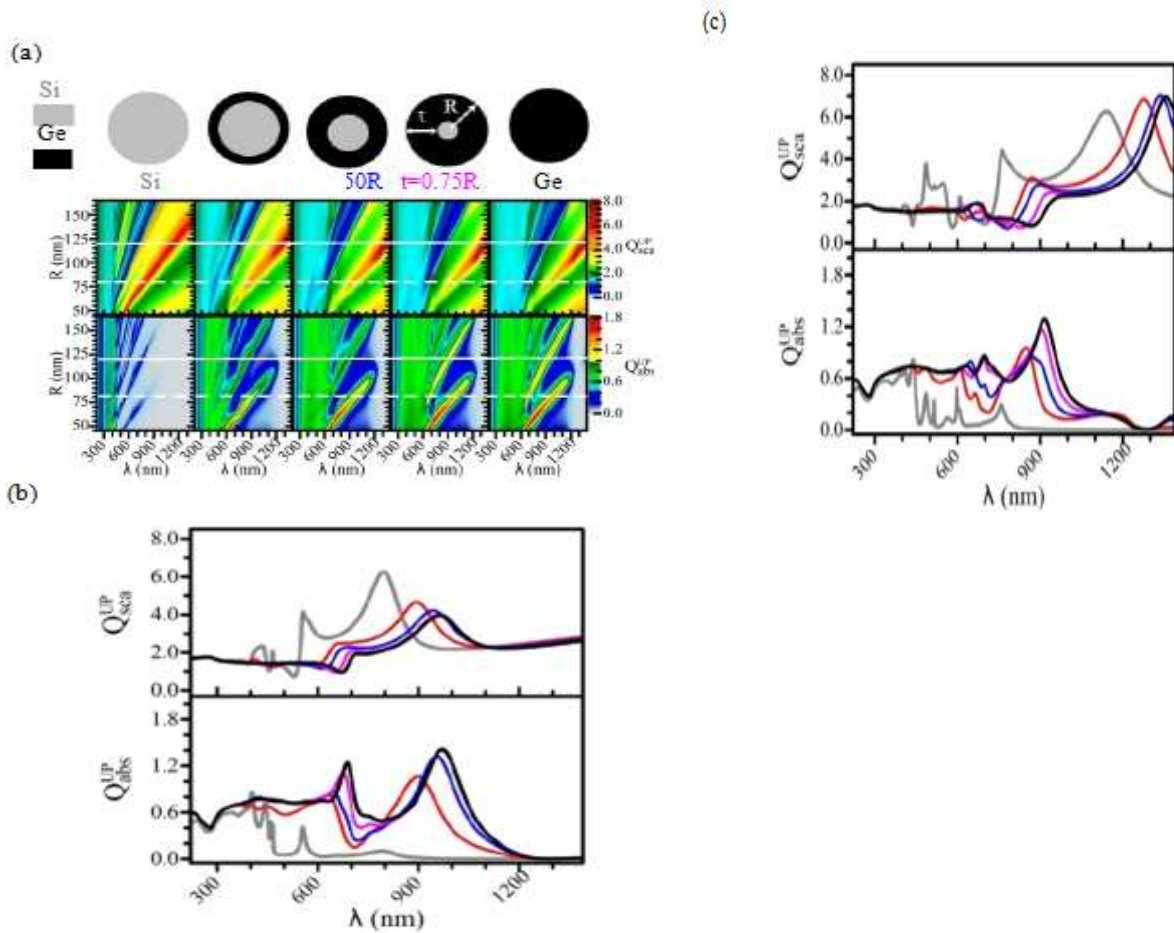


figure III.14 Idem mais pour un nanofil cœur/gain Si/Ge [60].

Contrairement aux nano fils Ge/Si, la variation de l'épaisseur  $t$  du gain de Ge, à rayon externe  $R$  constant, d'un nano fil Si/Ge ne permet pas un ajustement spectral flexible de la réponse optique. Les nano fils Ge/Si sont a priori plus appropriés que les nano fils Si/Ge pour être à la base des cellules solaires. Néanmoins, afin d'évaluer l'efficacité relative de ces hétéro structures cœur/gaine, il se révèle important de les comparer tout en fixant une même composition  $x$  et un même diamètre. Cette comparaison fait l'objet de la section suivante [60].

**5.5. Comparaison entre nano fils SiGe à hétéro structure radiale à structure simple d'alliage  $Si_{1-x}Ge_x$**

Nous comparons ici les propriétés optiques des nano fils SiGe à structure cœur/gaine, soit des nano fils Ge/Si et des nano fils Si/Ge, avec celles des nano fils à structure simple d'alliage  $Si_{1-x}Ge_x$ . La comparaison est fondée sur deux aspects (i) spectre d'efficacité d'absorption et spectre d'efficacité de diffusion, et (ii) intégrale d'absorption solaire  $J_{solar}$  qui est proportionnelle au photo courant ultime.

La fraction  $x$  en Ge dans un nano fil SiGe à structure cœur/gaine est calculée comme suit :

$$x = \frac{n_{Ge} \times V_{Ge}}{n_{Si} \times V_{Si} + n_{Ge} \times V_{Ge}} \quad (III.40)$$

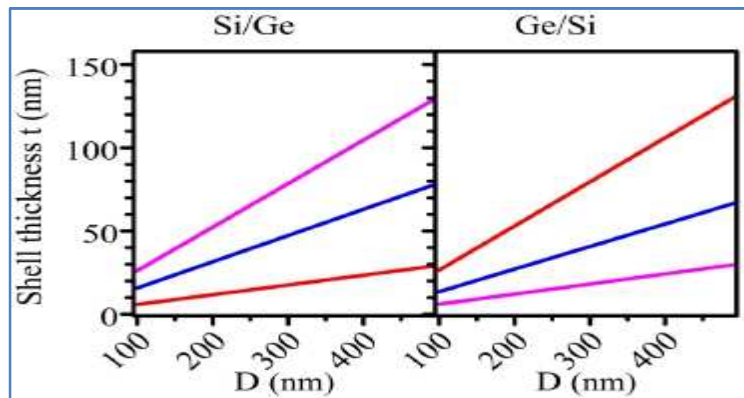
Tels que  $n_{Ge}=4.42 \cdot 10^{22}$  atomes/cm<sup>3</sup> et  $n_{Si}=4.42 \cdot 10^{22}$  atomes/cm<sup>3</sup> sont les densités atomiques de germanium et de silicium respectivement, et  $V_{Ge}$  et  $V_{Si}$  sont les volumes occupés dans le nano fil par les atomes de Ge et de Si respectivement. Ainsi, dans un nano fil cœur/gaine Ge/Si,  $x$  est donnée par :

$$x = \frac{n_{Ge} \times (R-t)^2}{n_{Ge} \times (R-t)^2 + n_{Si} \times (R^2 \times (R-t)^2)} \quad (III.41)$$

Et pour un nano fil cœur/gaine Si/Ge, l'expression de  $x$  est donnée par :

$$x = \frac{n_{Ge} \times (R^2 \times (R-t)^2)}{n_{Si} \times (R-t)^2 + n_{Ge} \times (R^2 \times (R-t)^2)} \quad (III.42)$$

La figure III.5 illustre l'épaisseur de la gaine ( $t$ ) en fonction du diamètre du nano fil pour deux variantes de nano fils SiGe à structure cœur/gaine avec différentes fractions en Ge  $x$  [60].



**Figure III.15** – Variation de la valeur  $t$  de l'épaisseur de la gaine en fonction du diamètre du nanofil  $D$  pour trois compositions  $x$  en Ge dans le cas d'un nanofil Si/Ge et d'un nanofil Ge/Si [60].

## 6. Propriétés électroniques ( Contribution personnelle ; programme, simulation I(V))

### 6.1. Principe de la simulation numérique

L'étude de la plupart des dispositifs à semi-conducteurs consiste à résoudre le système d'équations suivant

#### Avec

$G$  est le taux génération des paires électrons- trous en volume due à l'absorption de la lumière (la photo-génération).

$U_n$ ,  $U_p$  sont les taux net de recombinaison en volume, respectivement des électrons et des trous.  $\Psi$  est le potentiel électrostatique

$$\left. \begin{array}{l}
 \underline{\text{Equations des courants}} \\
 J_n = ne\mu_n \mathbf{E} + eD_n \text{grad}n \\
 J_p = ne\mu_p \mathbf{E} + eD_p \text{grad}p \\
 \underline{\text{Equations de continuité}} \\
 \frac{\partial n}{\partial t} = G - U_n + \frac{1}{e} \text{div}(\mathbf{J}_n) \\
 \frac{\partial p}{\partial t} = G - U_p + \frac{1}{e} \text{div}(\mathbf{J}_p) \\
 \underline{\text{Equation de Poisson}} \\
 \Delta \Psi = -\frac{e}{\epsilon} (N_d - N_a + p - n)
 \end{array} \right\}$$

## 6.2. Structure à simuler

La simulation numérique de la structure photovoltaïque a été effectuée en utilisant le logiciel Microvolt. Les paramètres sont choisis selon les moyens technologiques utilisés dans la réalisation des cellules photovoltaïques de 3<sup>ème</sup> génération.

Pour simuler l'influence des différents paramètres de notre structure, nous définissons une cellule solaire de référence avec un ensemble de paramètres fixés, puis nous varions les paramètres afin d'analyser leur influence sur le rendement de la cellule solaire.

La simulation numérique par Microvolt est basée sur la résolution numérique des trois équations fondamentales de transport de charges dans les semi-conducteurs qui sont respectivement l'équation de Poisson et l'équation de continuité pour les électrons et les trous. Après le maillage de la structure étudiée, le simulateur évalue numériquement la résolution de ces équations à chaque noeud du maillage.

Cependant, la caractéristique courant-tension (I-V) est simulée sous les conditions standards d'éclairement (AM1.5G).

En raison de la structure périodique des cellules nanométriques, nous simulons uniquement une partie élémentaire de la cellule. La figure III.16 représente la structure et les paramètres de la cellule de référence utilisée pendant la simulation. Les distances fixées sont conformes aux spécificités technologiques liées essentiellement à la sérigraphie.

Ici, nous montrons comment simuler 2D multicouche utilisant Microvolt. Toutes les dimensions sont utilisées ont montré à l'image ci-dessous. Case  $w = \text{longueur} / 2$  correspond à la diode planaire.

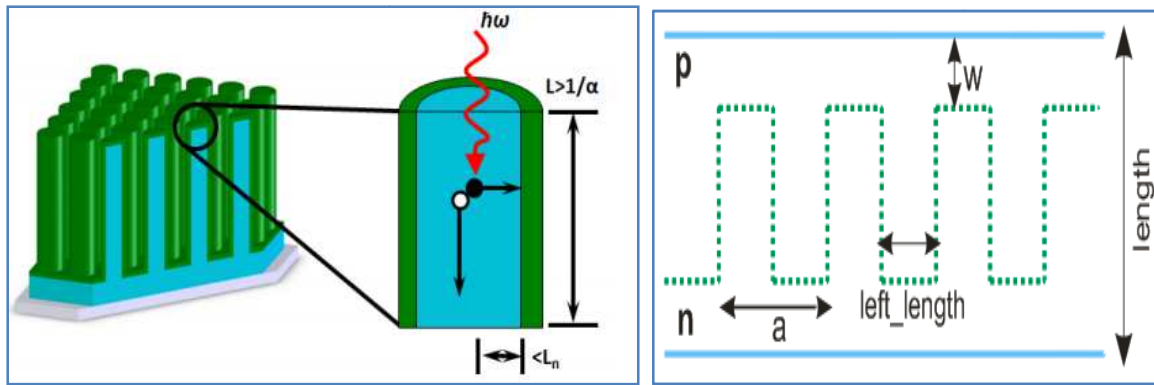


Figure III.16: Structure de la cellule de référence simulée sous Microvolt.

**Paramètre de la structure simulée**

Nano fil	
Epaisseur	<b>W=0.2nm</b>
Diamètre initial	<b>d=80 nm</b>
Longueur de nano fil après 60 min	<b>L=120nm</b>
Dopage	<b>N=10<sup>19</sup>cm<sup>-3</sup></b>

Nous présentons ici les nano fils de silicium avec une hauteur  $h = 2 \text{ pm}$ , de rayon max  $R = 200 \text{ nm}$ , et la distance de l'interface p n à partir de la face extérieure du nano fil  $d = 100 \text{ nm}$ . Les nano fils sont agencés en un réseau carré de période  $a = 800 \text{ nm}$  et noyés dans de la silice (indice de réfraction  $n = 1,5$ ) jusqu'à leur surface supérieure. Il n'y a pas d'arrière- réflecteur au-dessous de nano fils, et dans la région au-dessus de la structure est de l'air.

Nous avons calculé dans les spectres de réflectance transmittance - absorption FDTD [ ], et le taux de génération (gamme de longueur d'onde intégrée est de 350 à 1100 nm.

Nous voyons ci-dessous le profil d'absorption à l'intérieur du nano fil pour les longueurs d'onde choisies (max = 10 (um)).

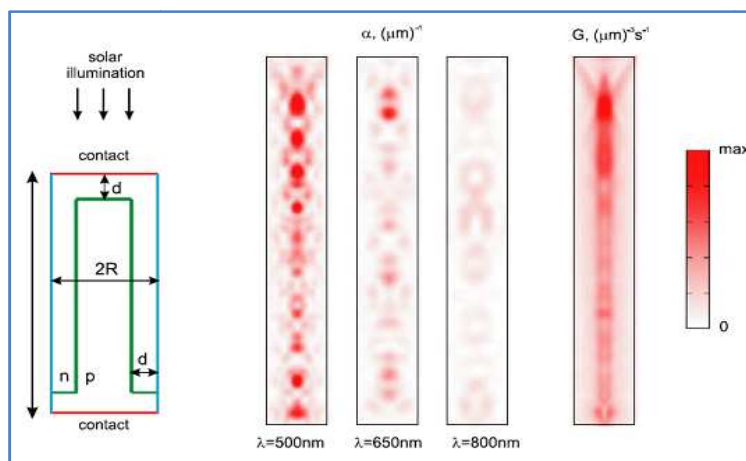


Figure III.17.la simulation de nano fils avec un profil de génération substitué à partir du fichier de sortie FDTD

Notons que maillage local peut être placé dans la région de forme courbe quelconque (pas nécessairement rectangulaire) . Cette région peut être une agrégation de sous-régions non

connectées aussi bien. Un nombre arbitraire de mailles peut être utilisé en même temps. Ceci est plusieurs maillages que nous utilisons dans la modélisation 3D de nano fils.

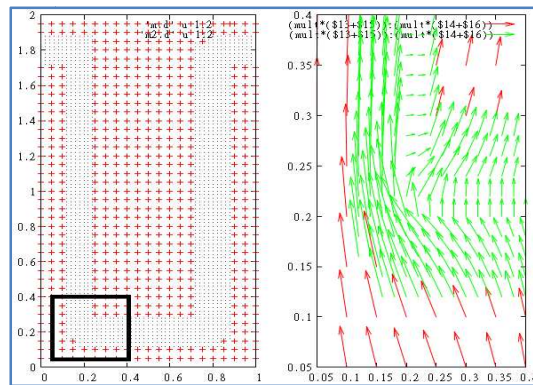


Figure III.18. Maillages utilisés dans la modélisation 3D de nano fils.

Les nano fils peuvent être utilisés comme une alternative aux cellules en couches minces. Un avantage est l'utilisation de la géométrie de la jonction radiale où l'absorption de la lumière et de collecte de porteurs sont découplés. Cette idée est la même que pour la géométrie multicouche. Un deuxième avantage est que des réseaux de nano fils peuvent être conçus pour avoir une réluctance très faible et absorber efficacement la lumière incidente.

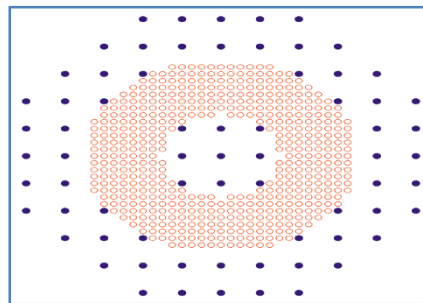


Figure III.19. Nano fil Utilisation de coordonnées radiales

## 6.3. Résultats de la simulation

### 6.3.1. Longueur des nano fils

La détermination des paramètres limitatifs du rendement à l'échelle nanométrique est compliquée car elle dépend des paramètres suivants :

- la longueur des nano fils
- la largeur des nano fils
- la direction des nano fils

Nous avons utilisé différents systèmes dans FDTD et Microvolt coordonner. Dans Microvolt, axe de nano fil passe coordonnées origine, et en bas de nano fil et supérieure coordonnées z sont 0 et h, en conséquence. Dans FDTD, axe de nano fils passent le point  $x = a / 2$ ,  $y = a / 2$ , et en bas de nano fil et supérieure coordonnées z sont h et 0. Pour rendre transformation linéaire et le décalage entre ces deux systèmes de coordonnées.

Ceci est entraîné IV- courbe. On normalise courant sur la zone de la une période de la structure à nano fil unique, a2.

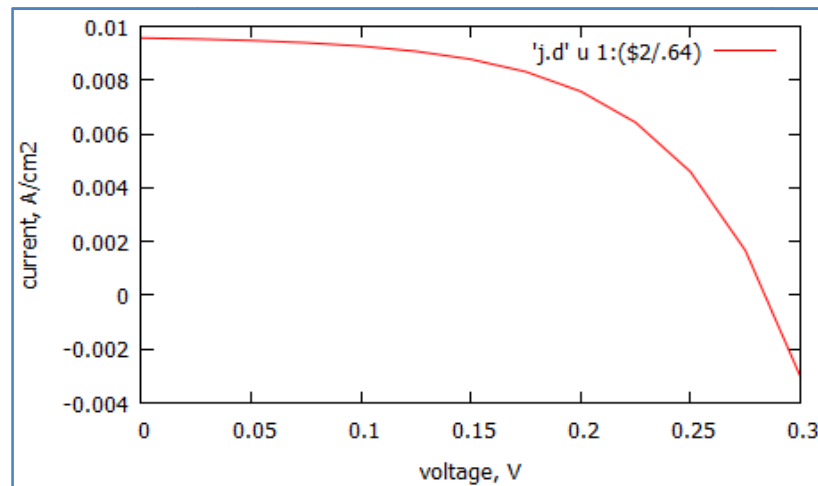


Figure III.20. Evolution de la caractéristique I-V en fonction de la largeur Nano fils.

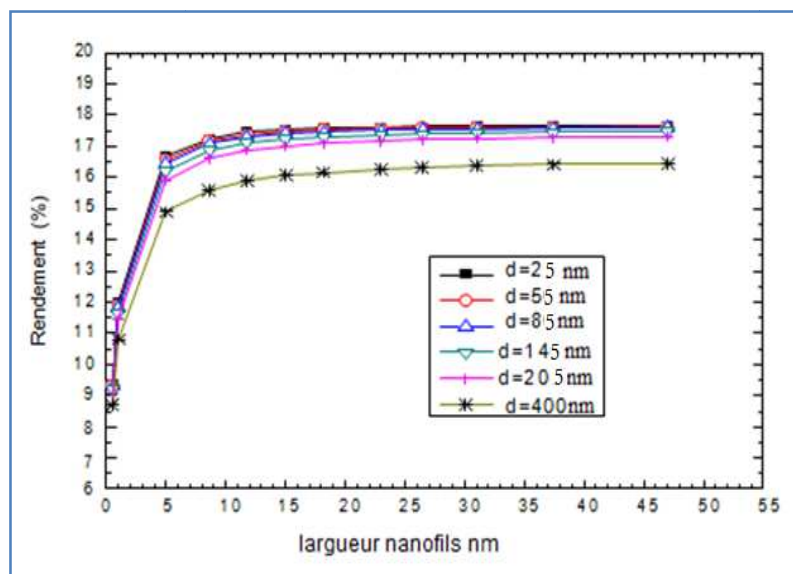


Figure III.21. Evolution du rendement de la cellule en fonction la longueur des nan fils pour diamètre.

On remarque dans la figure III.21 une décroissance du rendement pour une augmentation de l'espacement. Ce répercute sur la génération de recombinaison plus importante. On constate aussi, que le rendement de conversion augmente jusqu'à un rapport égal à 18, puis la courbe commence à saturer (pour des valeurs supérieur à 17), Donc il est préférable d'augmenter la largeur de jonction pour augmenter le photo courant de la cellule.



### 6.3.2. Influence de la longueur des nano fils

Dans cette étude, nous considérons les trois paramètres de la structure nano fils du Si (le courant de court-circuit, la tension de circuit ouvert et le rendement de conversion).

La figure (III.22) montre l'influence de la longueur des nano fils sur les trois paramètres de la structure. Sur ces figures, nous considérons deux largeurs de nano fil déterminé à partir du germe de croissance ( $d=80\text{nm}$  et  $d=40\text{nm}$ ) et un intervalle de longueur des nano fils ( $0 < L = 55\mu\text{m}$ ), afin de comprendre l'influence de la longueur sur l'efficacité de la structure Nano fils du Silicium.

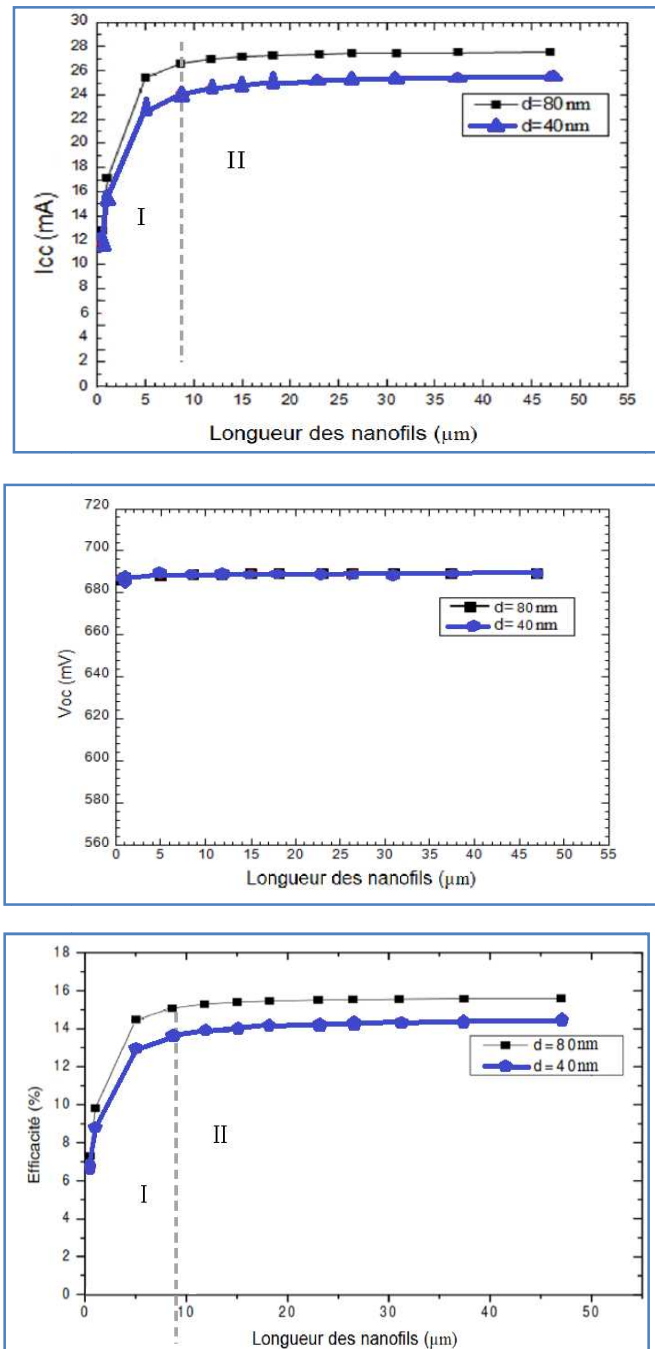


Figure III.22 Evolution du courant de court-circuit (a), de la tension de circuit ouvert (b) et du rendement de la cellule (c) en fonction les longueurs des nano fils

A partir de cette figure, nous observons que pour des valeurs de longueur  $L$  des nano fils simulés moins que 10 le rendement est d'environ [6% - 11%] et [8% - 12%] pour les deux types de nano fils proposés. Et pour les longueurs supérieures à  $L= 10\mu\text{m}$ , le rendement se sature entre 14% et 12%.

## 6.4. Influence du dopage

### 6.4.1. Dopage du substrat

La figure IV-8 illustre l'effet du niveau de dopage du substrat sur le rendement de conversion de la structure à des nano fils du Si en fonction de  $d = 40\text{nm}$  et  $80\text{nm}$  et la longueur des nano fils.

On constate sur la figure que l'augmentation du niveau de dopage du substrat permet une amélioration remarquable du rendement de conversion de la structure. Cette amélioration est d'autant plus importante que si la longueur des nano fils est grande. En effet, avec l'augmentation du niveau de dopage du substrat, la durée de vie des porteurs minoritaires et la mobilité augmentent aussi.

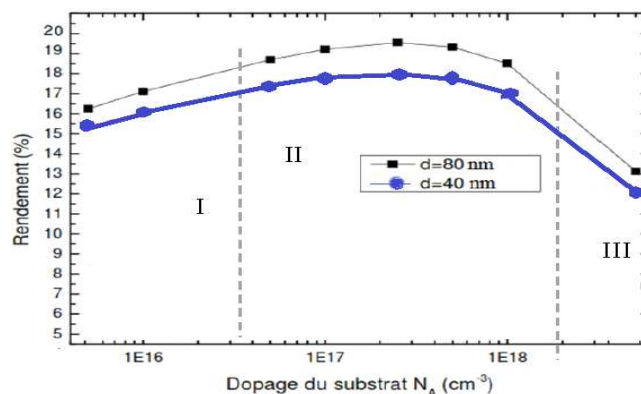


Figure III.23. Evolution du rendement de la cellule en fonction du dopage du substrat Pour la cellule de référence et pour deux diamètres

Dans la figure III.23 nous représentons les caractéristiques du rendement électrique en fonction du dopage pour largeur de nano fils ( $d= 80$  et  $400\text{nm}$ ) et la variation de la longueur des nano fils. Nous remarquons dans celle-ci l'existence de trois zones :

Dans la première zone (I) : il y'a une augmentation proportionnelle du rendement avec le dopage, ce phénomène est dû à l'augmentation des paires électrons-trous.

Dans la deuxième zone (II) : il y'a saturation du rendement en fonction de la variation du dopage. Il y'a donc assez de paires e-t pour assurer le déplacement électronique.

Et dans la dernière zone (III) : il y'a une diminution du rendement. Ceci est dû à l'augmentation des impuretés dans le réseau du silicium.

## 7. Propriétés électroniques (Contribution personnelle ; programme, simulation I(V))

Dans cette partie, nous avons simulé des cellules solaires à base de silicium nanocristallin hydrogéné de type p-i-n.

### 7.1 Structure de la cellule solaire simulée

La structure simulée est basée sur le silicium nanocristallin hydrogéné (nc-Si:H). La cellule a été déposée sur un substrat métallique qui joue le rôle de contact arrière. Pour le contact avant, une couche TCO (Transparent Conducting Oxide) a été déposée, sur le côté p.

Le dispositif est constitué d'une couche i-nc-Si:H intrinsèque d'épaisseur variable entre 500 nm et 2000 nm, prise en « sandwich » entre une couche n-a-Si:H d'épaisseur 10 nm et une couche fenêtre p à base de silicium nanocristallin d'épaisseur variable entre 8 nm et 30 nm (figure III.24). Une couche tampon intrinsèque à base de silicium nanocristallin (i-nc-Si:H) d'épaisseur 3 nm, a été incorporée entre la couche p et la couche active.

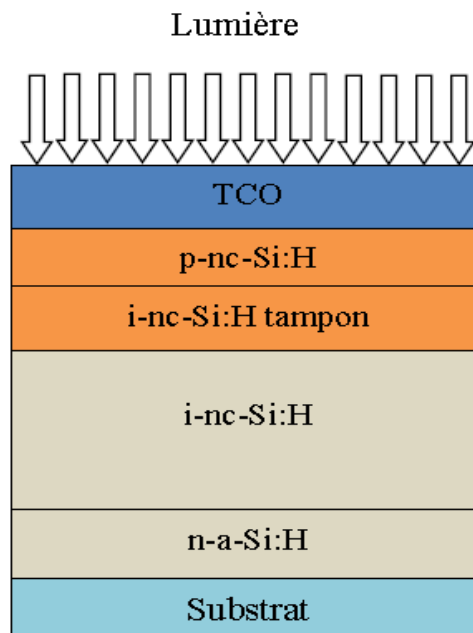


Figure III.24. Schéma de la cellule p-i-n simulée.

### 7.2. Modèle de simulation pour le silicium nanocristallin hydrogéné

Le code AMPS-1D, utilisé dans notre simulation, est basé sur la résolution de l'équation de Poisson couplée aux équations de continuité des électrons et des trous, à chaque position dans le dispositif [64, 65]. La résolution de ces différentes équations est réalisée par les méthodes des différences finies et de Newton-Raphson.

AMPS-1D simule le fonctionnement du dispositif en prenant en compte les statistiques de recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH). La simulation numérique nécessite également un modèle pour la densité des états pièges dans la structure. Pour la densité d'état locale, présente dans la bande interdite du silicium amorphe et du silicium nanocristallin oxydé, il a été supposé l'existence de deux types d'états, les états accepteurs et les états donneurs. Leurs

densités sont modélisées par des queues de bande exponentielles (Urbach queues) et états gaussiens, associé aux liaisons pendantes.

**7.3. Paramètres d'entrées optiques et électriques utilisés pour la simulation**

Le calcul utilisant le programme d'analyse unidimensionnelle des structures microélectroniques et photoniques AMPS-1D nécessite des paramètres d'entrée.

**7.3.1. Paramètres d'entrées optiques**

Un rayonnement solaire AM 1,5 avec une densité de puissance de 100 mW/cm<sup>2</sup>, comme une source d'éclairement, a été adoptée. La réflexion de la lumière à la face avant (RF) a été fixée à 0,2. Pour le contact arrière nous avons choisi la valeur de 0,6 pour rétro-réflexion (RB).

Le coefficient d'absorption, pour les différentes couches ont été intégrés dans le code AMPS-1D.

**7.3.2. Paramètres d'entrées électriques**

Le calcul utilisant le programme AMPS-1D nécessite des paramètres d'entrée tels que les vitesses de recombinaison en surface, les hauteurs de barrières, la densité de puissance du rayonnement ainsi que les caractéristiques des couches constituant la structure à simuler. Tous les paramètres d'entrées électriques utilisées dans la simulation sont résumés dans le tableau.III.2.

Parameters	p-nc-Si:H	tampon i-nc-Si:H	i-nc-Si:H	n-a-Si:H
$\epsilon_i$	11,9	11,9	11,9	11,9
L (nm)	variable	3	variable	10
$\chi$ (eV)	3,9	4,00	4,00	4,00
$E_g$ (eV)	variable	variable	variable	1,8
$N_C$ (cm <sup>-3</sup> )	1 x 10 <sup>21</sup>	2 x 10 <sup>20</sup>	2 x 10 <sup>20</sup>	2 x 10 <sup>20</sup>
$N_V$ (cm <sup>-3</sup> )	1x 10 <sup>21</sup>	2 x 10 <sup>20</sup>	2x 10 <sup>20</sup>	2 x 10 <sup>20</sup>
$\mu_{nc}$ (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	100	32	32	10
$\mu_{na}$ (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	25	8	8	4
$N_A$ (cm <sup>-3</sup> )	3 x 10 <sup>19</sup>	0	0	0
$N_D$ (cm <sup>-3</sup> )	0	0	0	1 x 10 <sup>19</sup>
$G_{D0}/G_{A0}$ (cm <sup>-2</sup> eV <sup>-1</sup> )	1 x 10 <sup>22</sup>	4x 10 <sup>21</sup>	2 x 10 <sup>21</sup>	4 x 10 <sup>21</sup>
$E_D/E_A$ (eV)	0,02 / 0,01	0,02 / 0,01	0,02 / 0,01	0,05 / 0,03
$\sigma_{de}$ (cm <sup>2</sup> ) (Tails)	4 x 10 <sup>-16</sup>	1 x 10 <sup>-15</sup>	1 x 10 <sup>-15</sup>	1 x 10 <sup>-15</sup>
$\sigma_{db}$ (cm <sup>2</sup> ) (Tails)	2 x 10 <sup>-17</sup>	1 x 10 <sup>-17</sup>	1 x 10 <sup>-16</sup>	1 x 10 <sup>-17</sup>
$\sigma_{ne}$ (cm <sup>2</sup> ) (Tails)	2 x 10 <sup>-17</sup>	1 x 10 <sup>-17</sup>	1 x 10 <sup>-16</sup>	1 x 10 <sup>-17</sup>
$\sigma_{nb}$ (cm <sup>2</sup> ) (Tails)	4 x 10 <sup>-16</sup>	1 x 10 <sup>-15</sup>	1 x 10 <sup>-15</sup>	1x10 <sup>-15</sup>
$N_{D0}$ (cm <sup>-3</sup> )	1 x 10 <sup>17</sup>	2 x 10 <sup>15</sup>	2 x 10 <sup>15</sup>	5 x 10 <sup>18</sup>
$N_{A0}$ (cm <sup>-3</sup> )	1 x 10 <sup>17</sup>	2 x 10 <sup>15</sup>	2 x 10 <sup>15</sup>	5 x 10 <sup>18</sup>
$E_{D0}/E_{A0}$ (eV)	1,25 / 1,15	1,13 / 0,15	1,08 / 0,98	1,05 / 0,96
$\sigma_{de}$ (cm <sup>2</sup> ) (Gauss.)	1 x 10 <sup>-14</sup>	1 x 10 <sup>-14</sup>	1 x 10 <sup>-15</sup>	1 x 10 <sup>-15</sup>
$\sigma_{db}$ (cm <sup>2</sup> ) (Gauss.)	1 x 10 <sup>-16</sup>	1 x 10 <sup>-16</sup>	1 x 10 <sup>-16</sup>	1 x 10 <sup>-16</sup>
$\sigma_{ne}$ (cm <sup>2</sup> ) (Gauss.)	1 x 10 <sup>-16</sup>	1 x 10 <sup>-16</sup>	1 x 10 <sup>-16</sup>	1 x 10 <sup>-16</sup>
$\sigma_{nb}$ (cm <sup>2</sup> ) (Gauss.)	1 x 10 <sup>-14</sup>	1 x 10 <sup>-14</sup>	1 x 10 <sup>-15</sup>	1 x 10 <sup>-15</sup>

**Tableau III.2.** Paramètres extraits de la simulation pour la structure simulée

Tels que, les abréviations utilisées dans ce tableau sont les suivantes :

$\epsilon_r$ : permittivité diélectrique relative

$L$ : épaisseur de couche.

$\chi$ : affinité électronique.

$E_g$ : gap d'énergie.

$\mu_e, \mu_h$ : mobilité des électrons et des trous.

$N_A, N_D$ : dopage en accepteurs et en donneurs.

$N_C, N_V$ : densités effectives d'états dans la bande de conduction et de valence.

$N_{DG}, N_{AG}$ : densités gaussiennes pour les états donneurs et accepteurs.

$G_{DO}, G_{AO}$ : pré facteurs des états queues de bande d/ a.

$E_D, E_A$ : énergies des états de queues de bandes donneurs et accepteurs.

$E_{DG}/E_{AG}$ : position de l'énergie de pointe gaussienne, pour les états donneurs et accepteurs.

Pour les électrons et les trous, nous avons utilisé la valeur de 107 cm/s comme vitesses de recombinaison en surface [66].

La hauteur des barrières du contact avant  $\phi_{bo}$  (TCO/p couche) et du contact arrière  $\phi_{bL}$  (n couche/métal) ont été fixées à 1,31 eV et 0,21 eV, respectivement.  $\phi_{bL}$  représente l'énergie d'activation de la couche n.

En ce qui concerne les énergies de bandes interdites, pour les couches intrinsèques nous avons choisi les valeurs variant de 1,3 eV à 1,6 eV. Pour la couche tampon nous avons choisi la valeur 1,56 eV. La valeur de 1,8 eV a été utilisée comme énergie de bande interdite, pour la couche n. Pour la couche fenêtre p-nc-Si:H les valeurs allant de 1.45 eV à 1,9 eV ont été utilisées dans nos calculs.

Dans la couche p-nanocristalline hydrogéné, les valeurs  $100 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{S}^{-1}$  et  $25 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{S}^{-1}$  ont été utilisés, respectivement, pour les mobilités des électrons ( $\mu_e$ ) et des trous ( $\mu_h$ ) [67]. Par contre pour les autres couches nanocristallines, à savoir la couche tampon et la couche active les valeurs  $32 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{S}^{-1}$  et  $8 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{S}^{-1}$  ont été utilisés, respectivement, pour les mobilités des électrons ( $\mu_e$ ) et des trous ( $\mu_h$ ).

### 7.3.3. Résultats de simulation et discussion

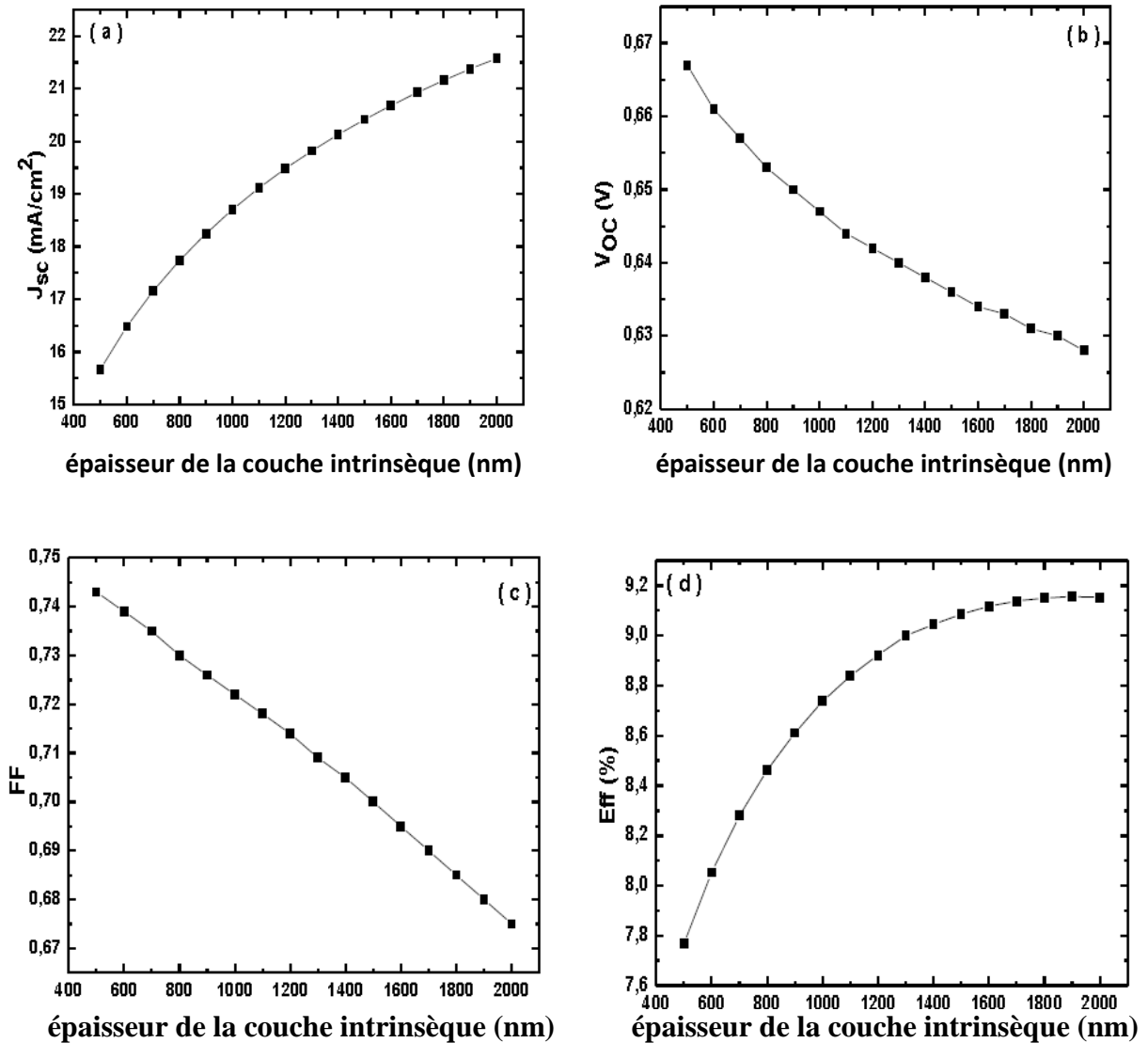
#### 7.3.3.1. Effet de l'épaisseur de la couche intrinsèque de la couche fenêtre et de la couche n

Pour étudier l'effet de l'épaisseur de la couche intrinsèque (i-nc-Si:H), de celles de la couche fenêtre (p-nc-Si:H) et de la couche n sur les performances de la cellule solaire à base de silicium nanocristallin hydrogéné, nous avons simulée la structure présentée dans la figure III.24.

##### a. Effet de l'épaisseur de la couche intrinsèque i-nc-Si:H

En fixant les gaps de la couche p, i tampon et i active à 1.6 eV, 1.46 eV et 1.4 eV, respectivement. Pour les épaisseurs, nous avons fixé l'épaisseur de p à 14 nm, de i tampon à 3

nm, de n à 10 nm et nous avons fait varier l'épaisseur de la couche absorbante de 500 nm jusqu'à 2000 nm. La figure III.25 représente la variation des paramètres de sortie la cellule en fonction de l'épaisseur de la couche intrinsèque : la densité de courant de court-circuit ( $J_{SC}$ ) augmente quand l'épaisseur de la couche intrinsèque augmente de 500 nm jusqu'à 2000 nm, ceci reflète que le taux de génération est grand, car en augmentant l'épaisseur de la couche i, il y aura une meilleure absorption, donc une grande probabilité de génération des paires électrons-trous (voir figure III.25-a-). Pour expliquer l'augmentation de  $J_{SC}$  en fonction de l'épaisseur de la couche active nous avons tracé la réponse spectacle (RS).

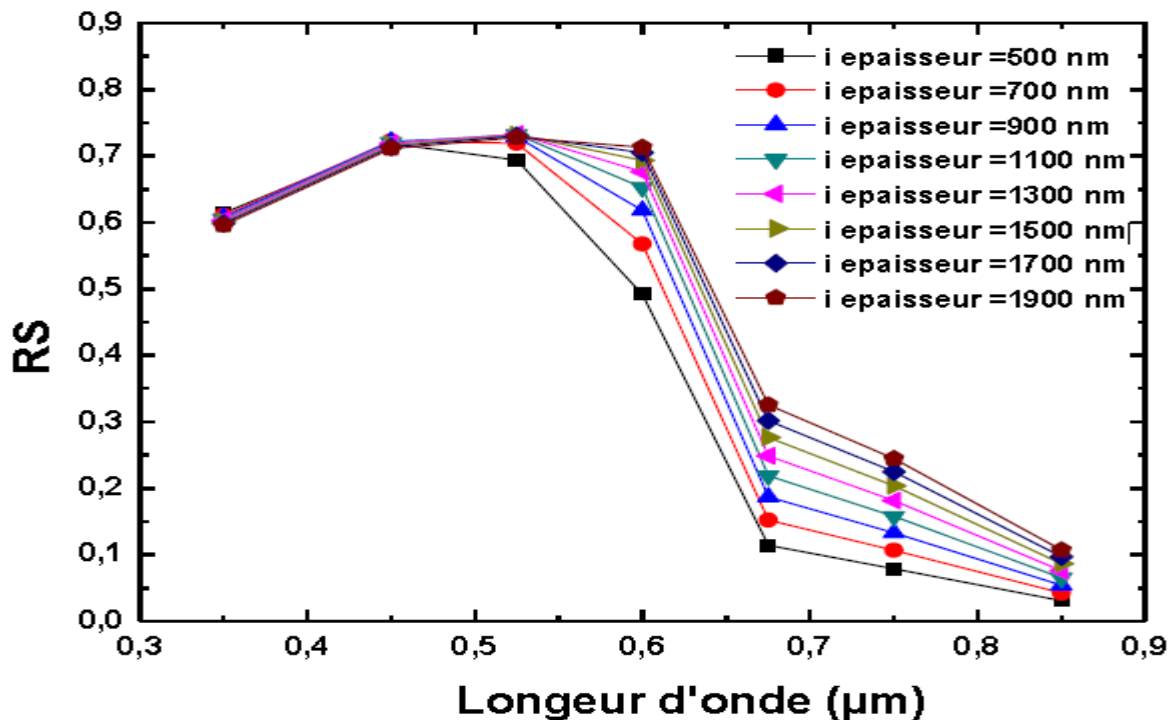


**Figure III.25.** Variation des caractéristiques de la cellule p-i-n en fonction de l'épaisseur de la couche intrinsèque : (a) le courant de court-circuit  $J_{sc}$ , (b) la tension en circuit-ouvert  $V_{oc}$ , (c) le facteur de forme (FF) et (d) l'efficacité.

La figure III.26. montre l'évolution de la réponse spectrale (RS) avec l'augmentation de l'épaisseur. De l'autre côté, la relation entre  $J_{SC}$  et RS est donnée par la relation suivante [68]:

$$J_{sc} = \int d\lambda \lambda f_{in} \lambda_{in} SR(\lambda)G(\lambda)A \quad \text{III.43}$$

Où  $G$  est le flux du spectre solaire AM1.5 et  $A$  la surface de la cellule



**Figure III.26.** Variation de la réponse spectrale de la cellule p-i-n en fonction de l'épaisseur de la couche intrinsèque.

D'après la figure III.26 il est clair que la réponse spectrale de la cellule augmente entre 550 nm et 850 nm avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche intrinsèque. D'après l'équation III.43 cette amélioration dans la réponse spectrale (RS) conduit à des meilleures valeurs pour le courant de court circuit  $J_{SC}$ .

Pour le  $V_{OC}$  il est très peu affecté par l'épaisseur de la couche i (voir figure III.25-b-). La figure III.25-c- montre que le FF diminue progressivement de 0,74 jusqu'à 0,68 lorsque l'épaisseur augmente de 500 nm jusqu'à 2000 nm. Cependant, l'efficacité enregistre des augmentations au fur et à mesure que l'épaisseur de la couche intrinsèque augmente et passe de 7,768 % lorsque  $i = 500$  nm jusqu'à 9,156% lorsque  $i = 1900$  nm, pour atteindre un pic lorsque l'épaisseur de la couche i est égale à 1900 nm, par contre, au de là de cette valeur, les porteurs de charge photo générés se recombinent rapidement et des problèmes de collection sont enregistrés, ce qui explique que l'efficacité commence à diminuer lentement pour passer de 9,156 % lorsque  $i = 1900$  nm à 9,153% lorsque  $i = 2000$  nm (voir figure III.25-d-). D'après ces résultats, on conclut que, la meilleure valeur de l'épaisseur de la couche active qui donne une meilleure efficacité de la cellule est celle de 1900 nm.

### b. Effet de l'épaisseur de la couche fenêtre p-nc-Si:H

Parce que la couche p agit comme une fenêtre de la cellule solaire, à partir de laquelle la lumière entrant dans la cellule, son épaisseur joue un rôle important dans l'absorption de

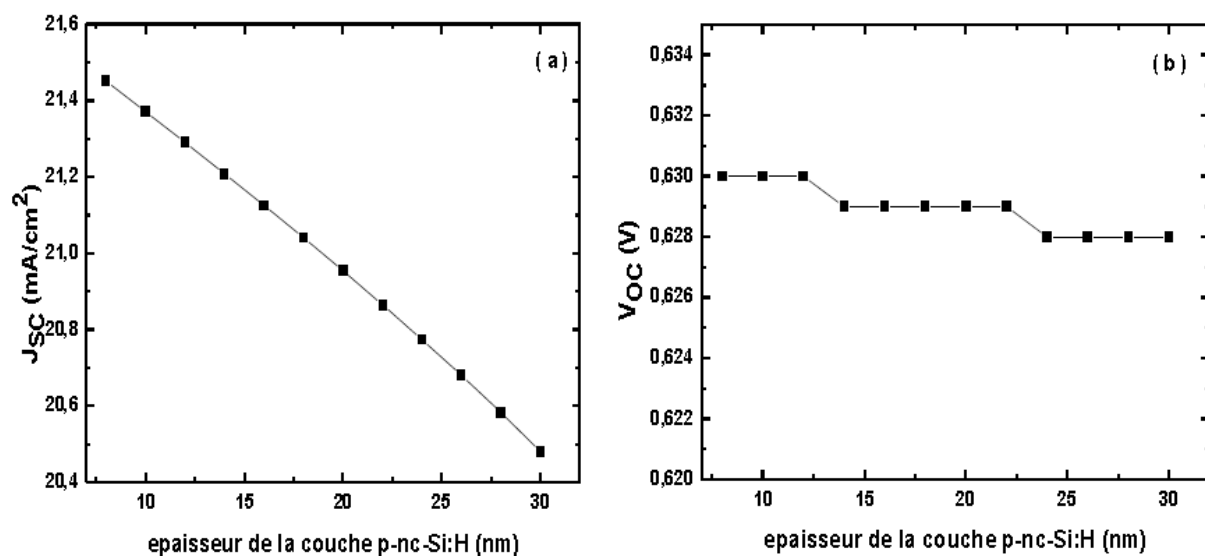
photons et la génération de paires électron-trou dans la couche intrinsèque. Pour cette raison l'épaisseur de la couche fenêtre p, dans une cellule solaire p-i-n, doit être faible. En effet, le silicium nanocristallin a un fort coefficient d'absorption et la lumière absorbée dans cette couche. Or, dans une structure photovoltaïque il faut que le maximum de la lumière doive impérativement atteindre la couche intrinsèque. De ce fait, nous avons fait varier l'épaisseur de la couche p pour voir son influence sur les paramètres de sortie de la cellule. En fixant les gaps de la couche p, i tampon et i active à 1.6 eV, 1.46 eV et 1.4 eV, respectivement. Pour les épaisseurs, nous avons fixé l'épaisseur de i tampon à 3 nm, de n à 10 nm et de i-active à 1900 nm nous. Par contre l'épaisseur de la couche fenêtre p nous l'avons fait varier de 8 nm jusqu'à 30 nm. La figure III.27 montre la variation des paramètres de sortie de la cellule en fonction de l'épaisseur de la couche fenêtre p-nc-Si:H.

Pour le  $V_{OC}$  (figure III.27-b-) et le FF (figure III.27-c-) sont peu affectés par l'augmentation de l'épaisseur de la couche p-nc-Si:H. Par contre le  $J_{SC}$  (figure III.27-a-) et l'efficacité (figure III.27-d-) diminuent au fur et à mesure que l'épaisseur de la couche p passe de 8 nm à 30 nm, il y'aura plus d'absorption dans la couche p, donc la lumière ne pourra pas atteindre la couche intrinsèque suffisamment, ce qui baisse la génération des paires électrons-trous. La valeur minimale de l'épaisseur de la couche p a été choisie égale à 8 nm, parce qu'il était difficile de contrôler expérimentalement l'épaisseur au-dessous de cette valeur pendant le dépôt de la couche. Les meilleurs résultats, selon nos calculs, sont obtenus avec une épaisseur de 8 nm. Mais, expérimentalement la majorité des travaux choisissent une épaisseur de la couche fenêtre p située dans la gamme de 8nm-15nm.

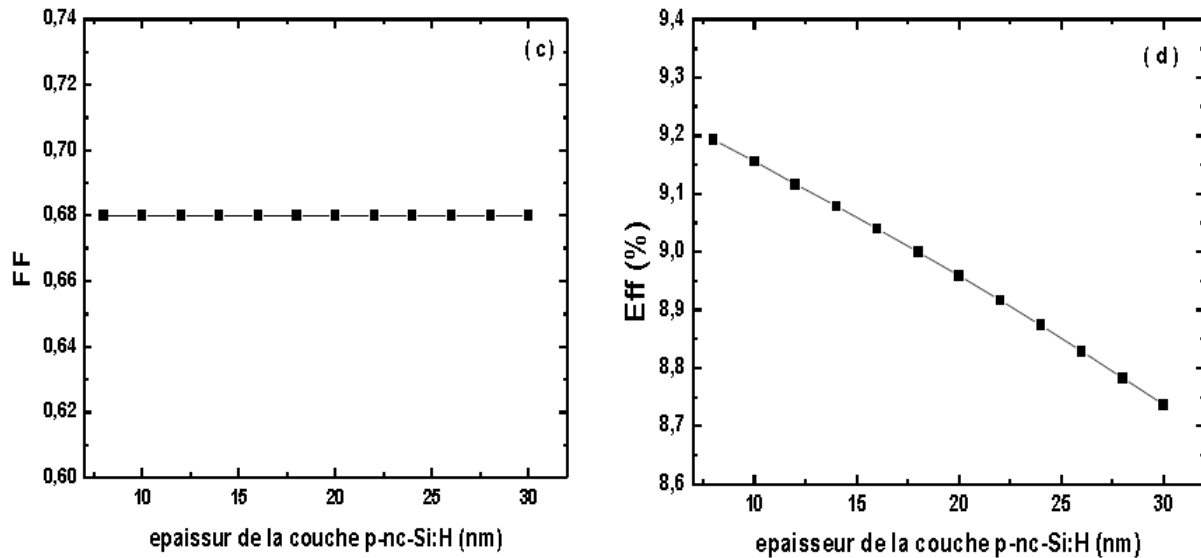
On sait que l'efficacité (Eff) EST exprimée comme suit :

$$Eff = \frac{j_{co} V_{oc} FF}{P_{in}} \quad \text{III.44.}$$

Où,  $P_{in}$  est la puissance incidente par unité de surface.

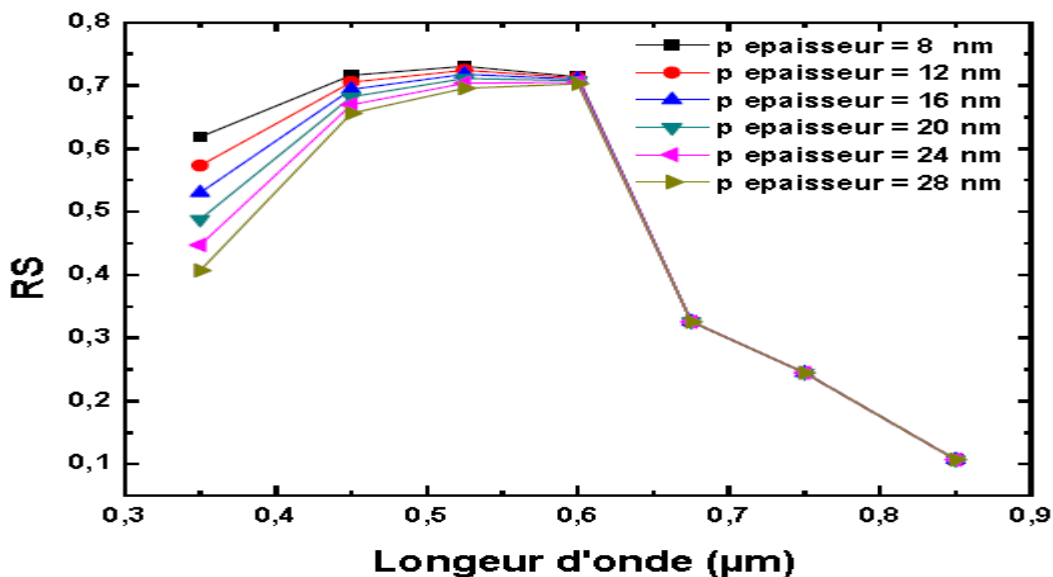






**Figure III.27.** Variation des caractéristiques de la cellule p-i-n en fonction de l'épaisseur de la couche fenêtre p-nc-Si:H : (a) le courant de court-circuit  $J_{SC}$ . (b) la tension en circuit-ouvert  $V_{OC}$ . (c) le facteur de forme (FF). (d) l'efficacité.

D'après l'équation (III.44) et parce que FF est constante et la diminution de  $V_{OC}$  n'est pas vraiment important, la diminution de l'efficacité est due essentiellement à la diminution de  $J_{SC}$ . Il ya deux façons d'interpréter la réduction de la valeur de  $J_{SC}$ . La première façon, due à l'augmentation de l'épaisseur la couche fenêtre p, ce qui provoque l'augmentation d'absorption optique de cette couche. Cependant, la lumière dans cette couche n'a aucune contribution au courant photo généré. La seconde façon, parce que la quantité de lumière passant à travers la couche active est réduite, le courant photo généré diminue, ce qui conduit le courant à travers l'ensemble du dispositif à diminuer. La figure III.28 représente la variation la réponse spectrale avec l'épaisseur de la couche fenêtre p.



**Figure III.28.** Variation de la réponse spectrale de la cellule p-i-n en fonction de l'épaisseur de la couche fenêtre p.

Il est évident que l'absorption dans la gamme courtes longueur d'onde est affectée par l'épaisseur de la couche fenêtre p. Toutefois, lorsque l'épaisseur de la couche p augmente, la réponse spectrale diminue, ce qui peut être dû à la variation de la recombinaison des porteurs dans la couche fenêtre excessivement épaisse. Il est clairement visible que la réponse spectrale de la région de courte longueur d'onde, comprise entre 350 nm et 550 nm, devient plus faible au fur et à mesure que la couche fenêtre p devienne plus épaisse, ainsi le courant photo-généré diminue.

### c.Effet de l'épaisseur de la couche n :

Dans cette section, nous avons fixé les gaps de la couche p, i tampon, i active et n à 1.6 eV, 1.46 eV, 1.4 eV et 1.8 eV, respectivement. Pour les épaisseurs, nous avons fixé l'épaisseur de p à 14 nm, de i tampon à 3 nm, de i active à 1900 nm et nous avons fait varier l'épaisseur de la couche n de 8 nm jusqu'à 26 nm. La figure III.29 représente la variation des paramètres de sortie la cellule en fonction de l'épaisseur de la couche n : il est clair que la densité de courant de court-circuit ( $J_{SC}$ ) diminue légèrement quand l'épaisseur de la couche n augmente de 8 nm jusqu'à 26 nm, donc  $J_{SC}$  est très peu affecté par l'épaisseur de la couche n (voir figure III.29-a-).

Pour le  $V_{OC}$  il est également très peu affecté par l'épaisseur de la couche n (voir figure III.29-b-). La figure III.29-c- montre que le FF diminue progressivement de 0.705 jusqu'à 0.666 lorsque l'épaisseur de la couche n augmente de 8 nm jusqu'à 26 nm. Par contre, l'efficacité est pratiquement constante et est égale à 11.4% lorsque l'épaisseur de la couche n varie de 8 nm jusqu'à 16 nm (figure III.29-d-). Cependant, au-delà de 16 nm l'efficacité commence à diminuer au fur et à mesure que l'épaisseur de la couche n augmente et passe de 11,4 % lorsque n-épaisseur = 8 nm jusqu'à 10,75% lorsque n-épaisseur = 26 nm. D'après l'équation III.44. La diminution de l'efficacité après la valeur de 16 nm est due principalement à la dégradation de la valeur du facteur de forme et aux légères diminutions de  $J_{SC}$  et  $V_{OC}$ . Ces résultats nous renseignent que la meilleure valeur de l'épaisseur de la couche n qui donne une meilleure efficacité de la cellule est située dans la gamme de 8 nm à 16 nm.

La figure III.30 représente la variation la réponse spectrale avec l'épaisseur de la couche fenêtre n. Il est clair que la réponse spectrale de la cellule n'est pas affectée du tout par l'épaisseur de la couche n. Ceci est dû au fait que, l'éclairage de la cellule se fait du côté p et, vu son épaisseur très faible, la couche n ne participe pas dans le processus de génération des porteurs photo-générés.

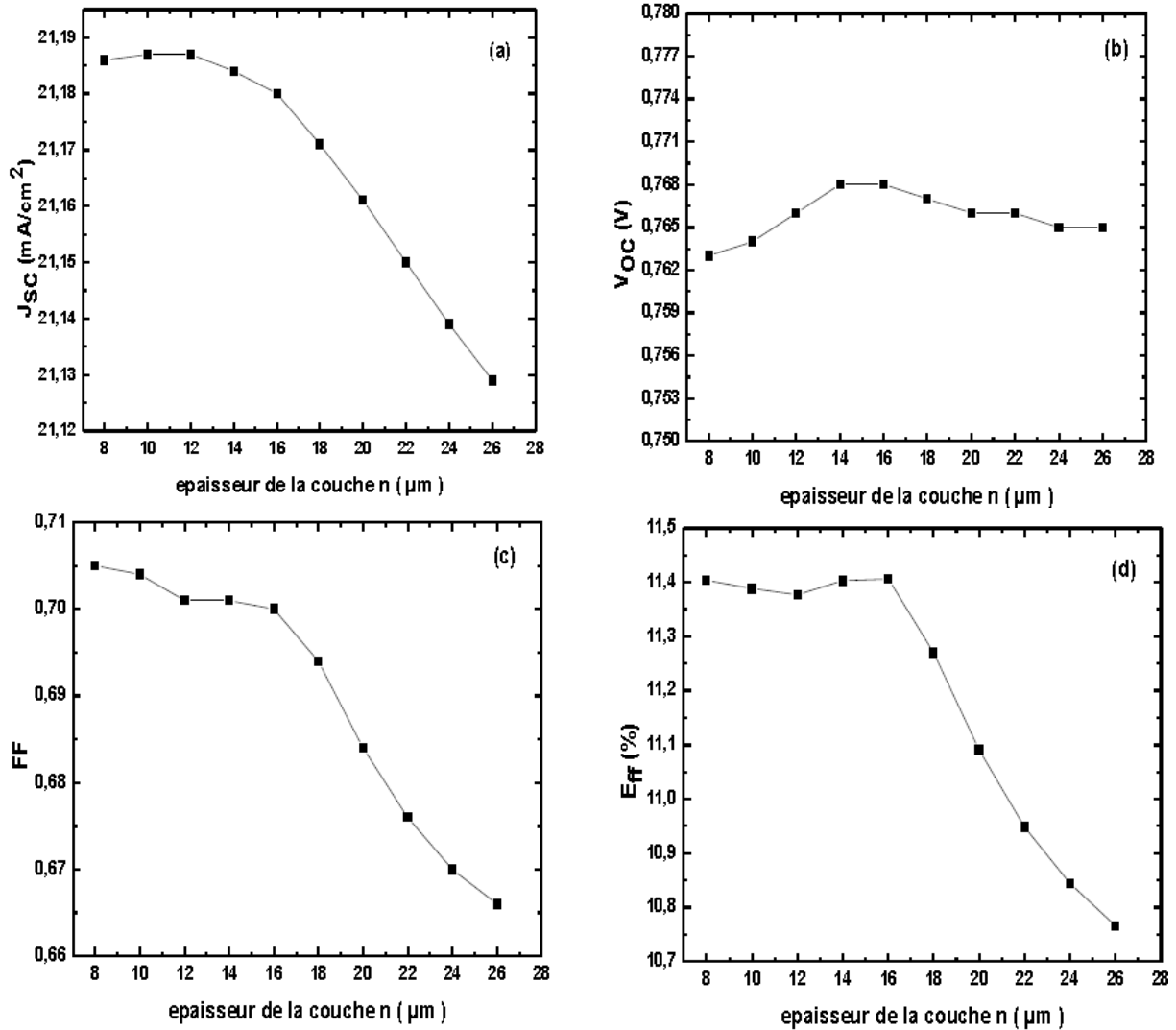


Figure III.29. Variation des caractéristiques de la cellule p-i-n en fonction de l'épaisseur de la couche n-nc-Si:H: (a) le courant de court-circuit J<sub>sc</sub>, (b) la tension en circuit-ouvert V<sub>oc</sub>, (c) le facteur de forme (FF) et (d) l'efficacité.

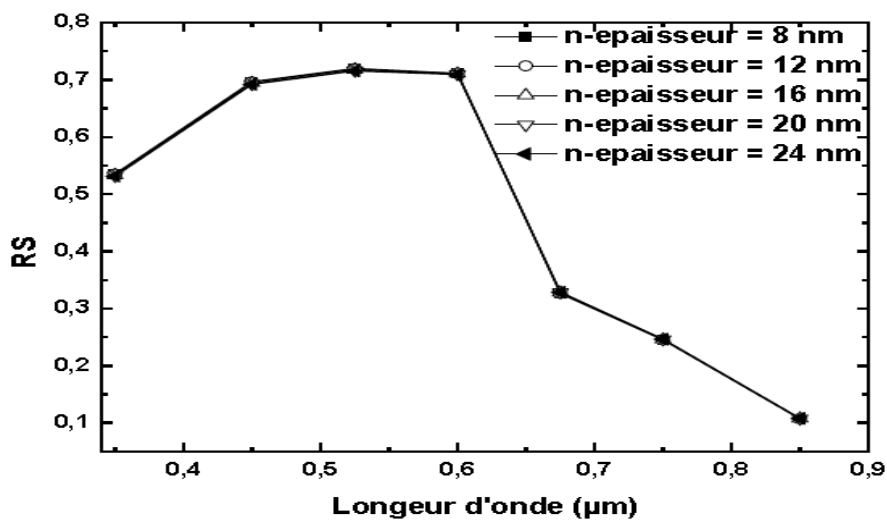


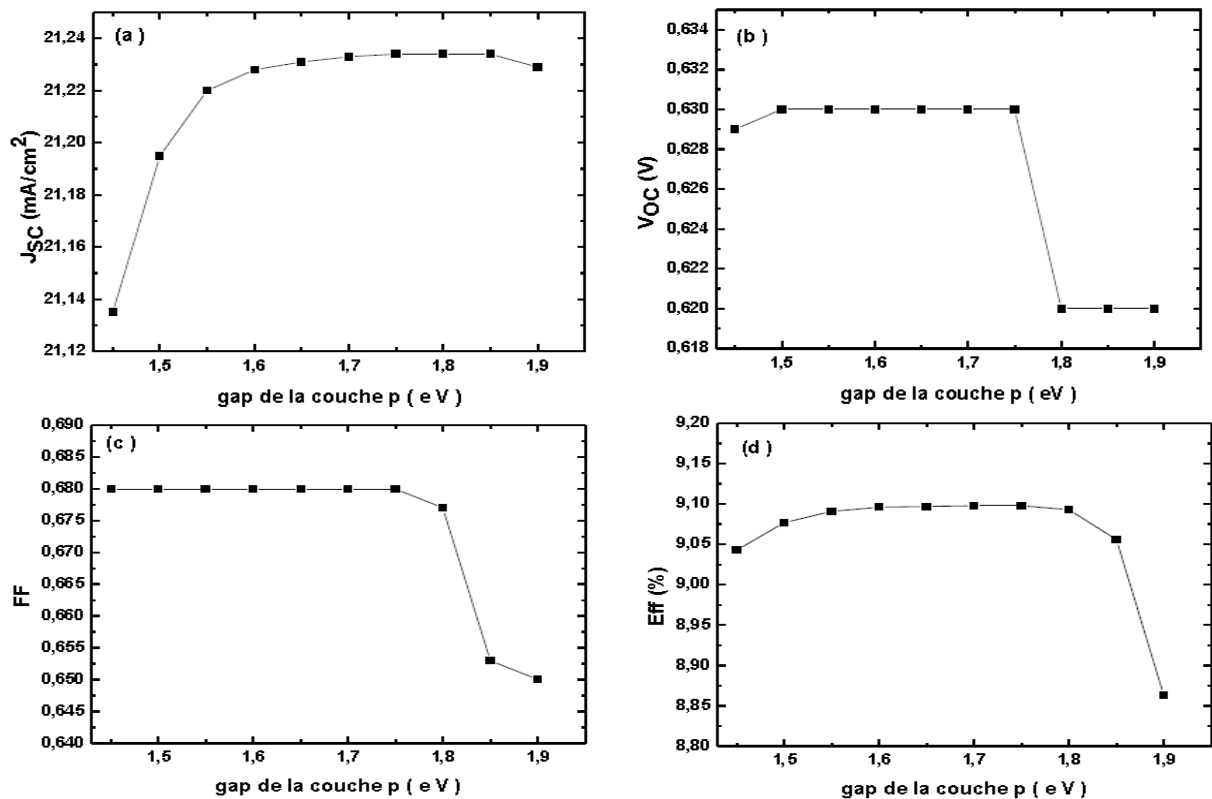
Figure III.30. Variation de la réponse spectrale de la cellule p-i-n en fonction de l'épaisseur de la couche n.

### 7.3.3.2. Effet du gap de la couche fenêtre de la couche tampon et de la couche intrinsèque

#### a. Effet du gap de la couche fenêtre :

Dans une cellule solaire, l'énergie de la bande interdite (le gap) de la couche fenêtre p, joue un rôle très important sur la quantité de la lumière qui atteint la couche active. Or, il faut que le maximum de la lumière doive impérativement atteindre la couche intrinsèque. De ce fait, nous avons fait varier le gap de la couche fenêtre p pour voir son influence sur les paramètres de sortie de la cellule. En fixant les épaisseurs de p à 14 nm i tampon à 3 nm, de n à 10 nm et de i-active à 1900 nm nous. Pour les gaps, nous avons choisi pour i tampon 1.46 eV, pour i active 1.4 eV et pour n 1.8 eV. Par contre le gap de la couche fenêtre p nous l'avons fait varié de 1.45 eV jusqu'à 1.9 eV. La figure III.31 montre la variation des paramètres de sortie de la cellule en fonction du gap de la couche fenêtre p-nc-Si:H.

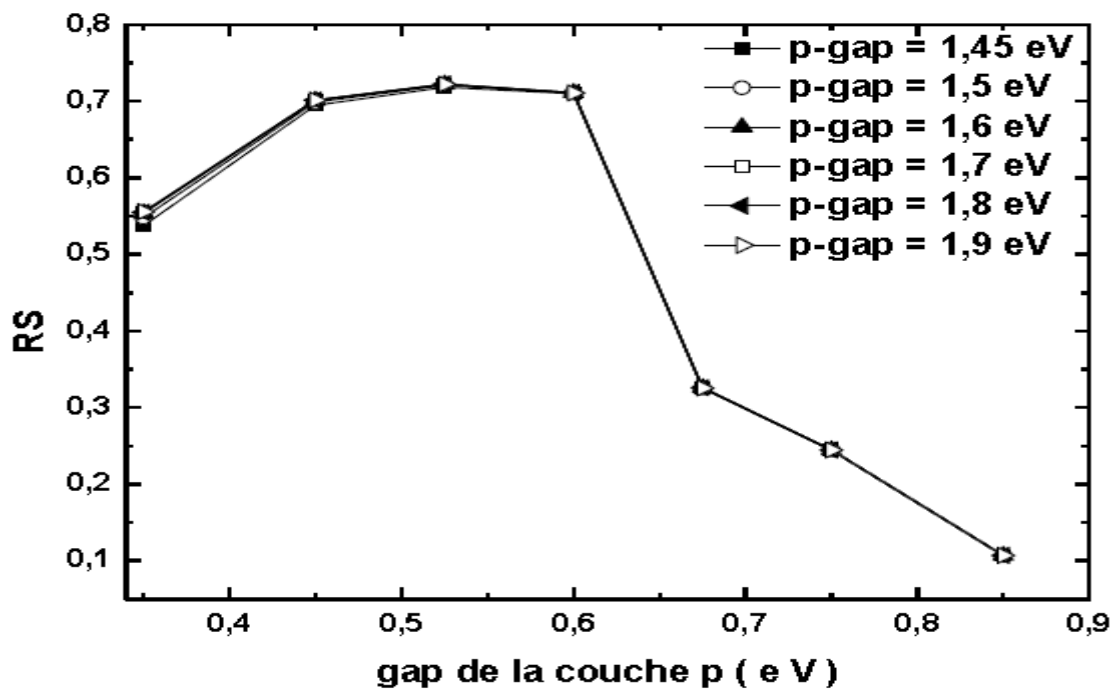
Pour le  $J_{SC}$  (figure III.31-a-) il enregistre une très faible augmentation, il passe de 21,13 mA/cm<sup>2</sup> jusqu'à 21,23 mA/cm<sup>2</sup> lorsque le gap de la couche p augmente de 1,45 eV jusqu'à 1,85 eV. Pour le  $V_{OC}$  (figure III.31-b-) il est très peu affecté par l'augmentation de du gap de la couche p-nc-Si:H. Par contre le FF (figure III31-c-) il a une valeur constante égale à 0,68 dans la gamme d'nergie de la couche p qui varié de 1,45 eV à 1,75 eV. Au-delà de 1,75 eV la valeur de FF commence a diminué progressivement pour atteindre la valeur de 0,65 lorsque le gap de p est de l'ordre de 1,9 eV. Sur la figure III.31-d- nous avons montré les variations de l'efficacité en fonction du gap de la couche p.



**Figure III.31.** Variation des caractéristiques de la cellule p-i-n en fonction du gap de la couche pnc-Si:H: (a) le courant de court-circuit  $J_{sc}$ , (b) la tension en circuit-ouvert  $V_{oc}$ , (c) le facteur de forme (FF) et (d) l'efficacité.

Dans un premier temps l'efficacité augmente légèrement pour passer de 9,05% à 9,10% lorsque le gap de p augmente de 1,45 eV jusqu'à 1,6 eV. Cependant, dans la gamme d'énergie de 1,6 eV jusqu'à 1,75 eV l'efficacité est constante. Au-delà de 1,75 eV l'efficacité commence à diminuer progressivement pour passer de 9,10% à 1,75 eV jusqu'à 8,85% à 1,9 eV. Les meilleurs résultats, selon nos calculs, sont donc obtenus lorsque la valeur du gap de la couche fenêtre p est située dans la gamme de 1,6 -1,75 eV.

La figure III.32 représente la variation la réponse spectrale avec l'augmentation du gap de la couche fenêtre p. Il est clairement visible que la réponse spectrale de la région de courte longueur d'onde, comprise entre 350 nm et 450 nm et très peu affectée par l'augmentation du gap de la couche p.



**Figure III.32.** Variation de la réponse spectrale de la cellule p-i-n en fonction du gap de la couche fenêtre p.

Le diagramme de bande d'énergie de la structure p-i-n est présenté dans la figure III.33. Pour bien comprendre l'effet de la variation de la valeur du gap de la couche fenêtre p nc-Si:H sur les performances de la cellule p-i-n, différents diagrammes de bande d'énergie de la dite structure ont été calculés et tracés à l'équilibre thermodynamique. Les résultats de nos calculs sont montés dans la figure III.34.

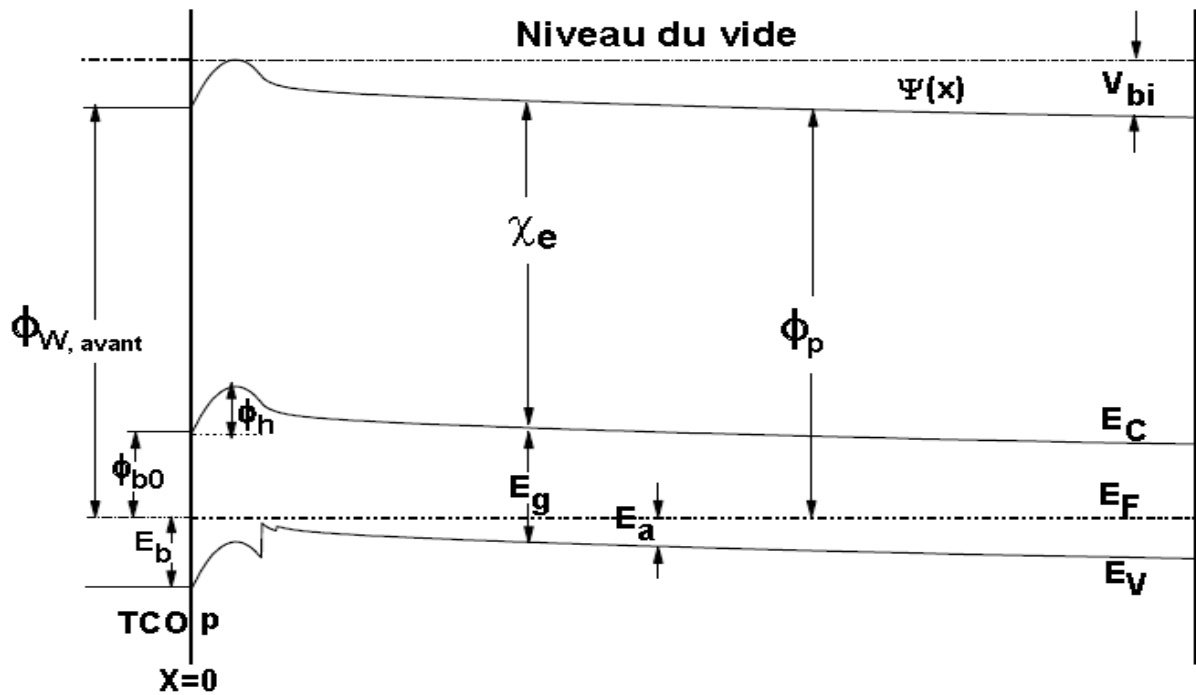


Figure III.33. Diagramme de bande d'énergie de la cellule p-i-n.

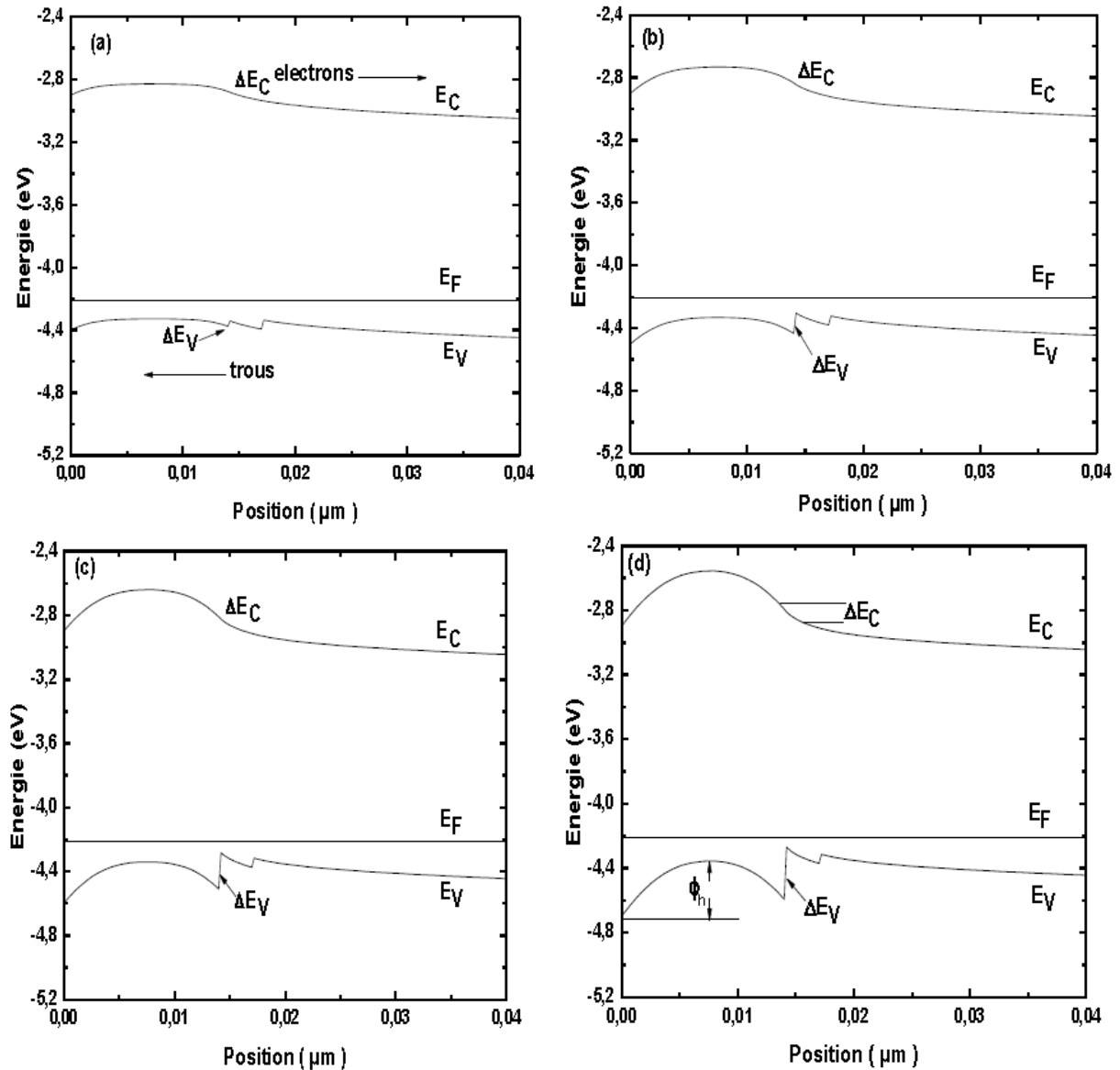
Selon Arch et al. [69] et Biron et al. [70], la hauteur de barrière pour le contact avant (TCO/p)  $\Phi_{b0}$  est donnée, en fonction de l'affinité électronique ( $\chi$ ) de la couche p et du travail de sortie  $\Phi_W$  de TCO par la relation:

$$\Phi_{b0} = \Phi_{W, \text{front}} - \chi_{e|_{x=0}} \quad \text{III.45}$$

$$\Phi_h = E_g(p) - E_a(p) - \Phi_{b0} \quad \text{III.46}$$

Tel que :  $E_g(p)$  et  $E_a(p)$  sont l'énergie de la bande interdite et l'énergie d'activation de la couche p, respectivement.

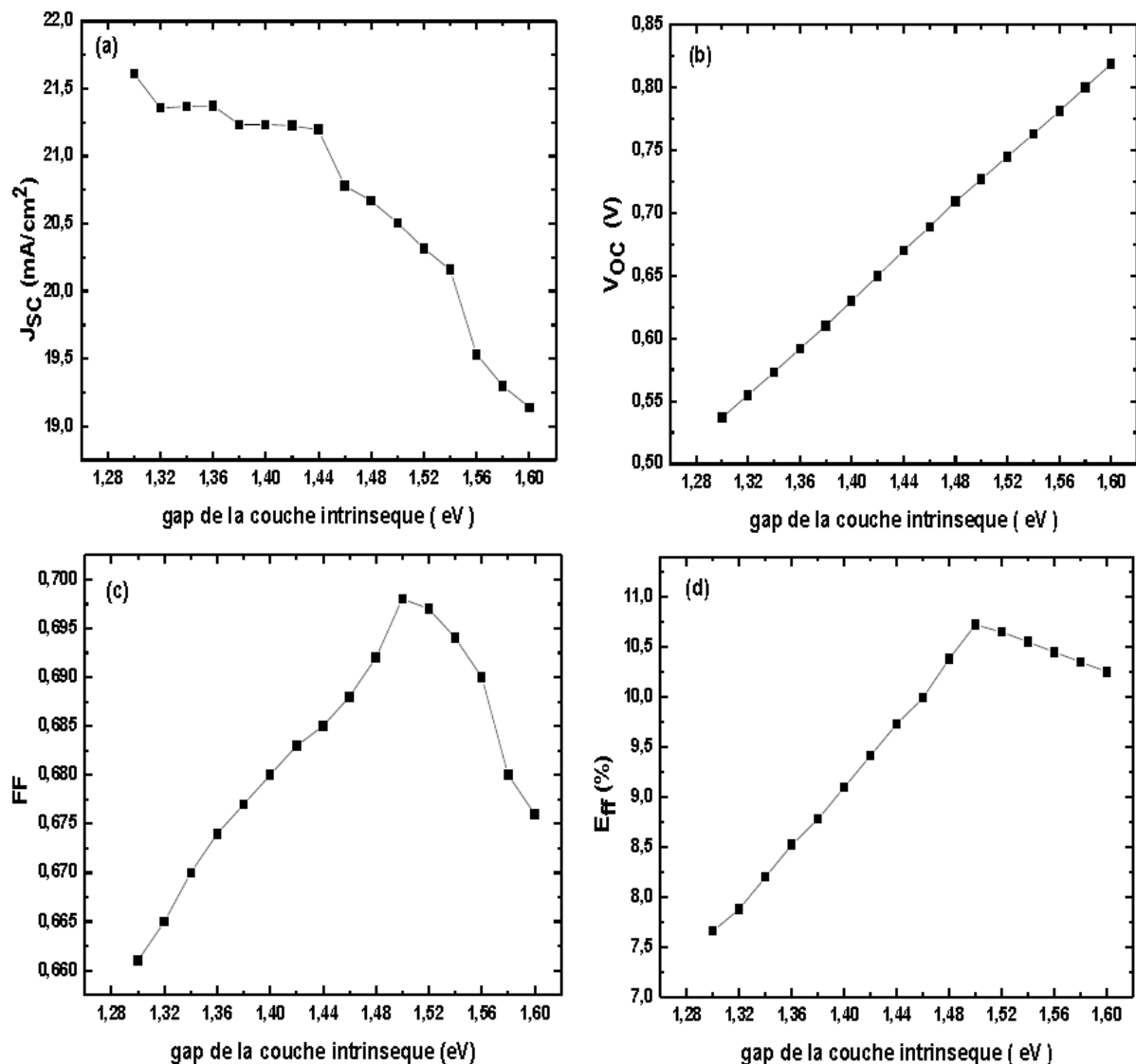
En fixant  $E_a(p)$ ,  $\Phi_{b0}$  et on fait varier la valeur de l'énergie de la bande interdite de la couche p. D'après les diagrammes de bande d'énergie présentés dans la figure III.34, les discontinuités de bande à l'interface entre la couche fenêtre p-nc-Si:H et la couche tampon i-n-Si:H, au niveau de la bande de conduction  $\Delta E_C$  et niveau de la bande de valence  $\Delta E_V$  augmentent au fur et à mesure que la valeur du gap de la couche p augmente. Pour  $\Delta E_C$  elle joue le rôle d'un réflecteur pour les électrons minoritaires qui essaient de se diriger vers le contact avant. Par contre,  $\Delta E_V$  joue le rôle d'une barrière qui empêche les trous majoritaires d'atteindre le contact avant. On constate également l'augmentation de la deuxième barrière pour les trous, représentée par  $\Phi_h$  dans la figure III.33, au niveau de l'interface TCO/p-nc-Si:H. L'augmentation de simultanée de  $\Delta E_V$  d'un côté et de  $\Phi_h$  de l'autre côté, fait baisser le taux de trous photo-générés qui peuvent atteindre le contact avant pour être collecter. Ceci explique la diminution des performances de la cellule pour des valeurs du gap de la couche p supérieure à 1,75 eV (Figure. III.31)



**Figure III.34.** Diagrammes de bande d'énergie de la cellule p-i-n pour différentes valeurs du gap de la couche p-nc-Si:H: (a)  $E_g = 1.5$  eV, (b)  $E_g = 1.6$  eV, (c)  $E_g = 1.7$  eV, (d)  $E_g = 1.8$  eV.

### b. influence du gap de la couche intrinsèque

Pour étudier l'effet du gap de la couche intrinsèque i-nc-Si:H sur les performances de la cellule p-i-n, nous avons fait varier la du gap de cette couche de 1,3 eV jusqu'à 1,6 eV. En fixant les épaisseurs de p à 14 nm, i tampon à 3 nm, de n à 10 nm et de i-active à 1900 nm. Pour les gaps, nous avons choisi pour p 1.7 eV, pour i tampon 1.54 eV et pour n 1.8 eV. La figure III.35 montre la variation des paramètres de sortie de la cellule en fonction du gap de la couche intrinsèque i-nc-Si:H.

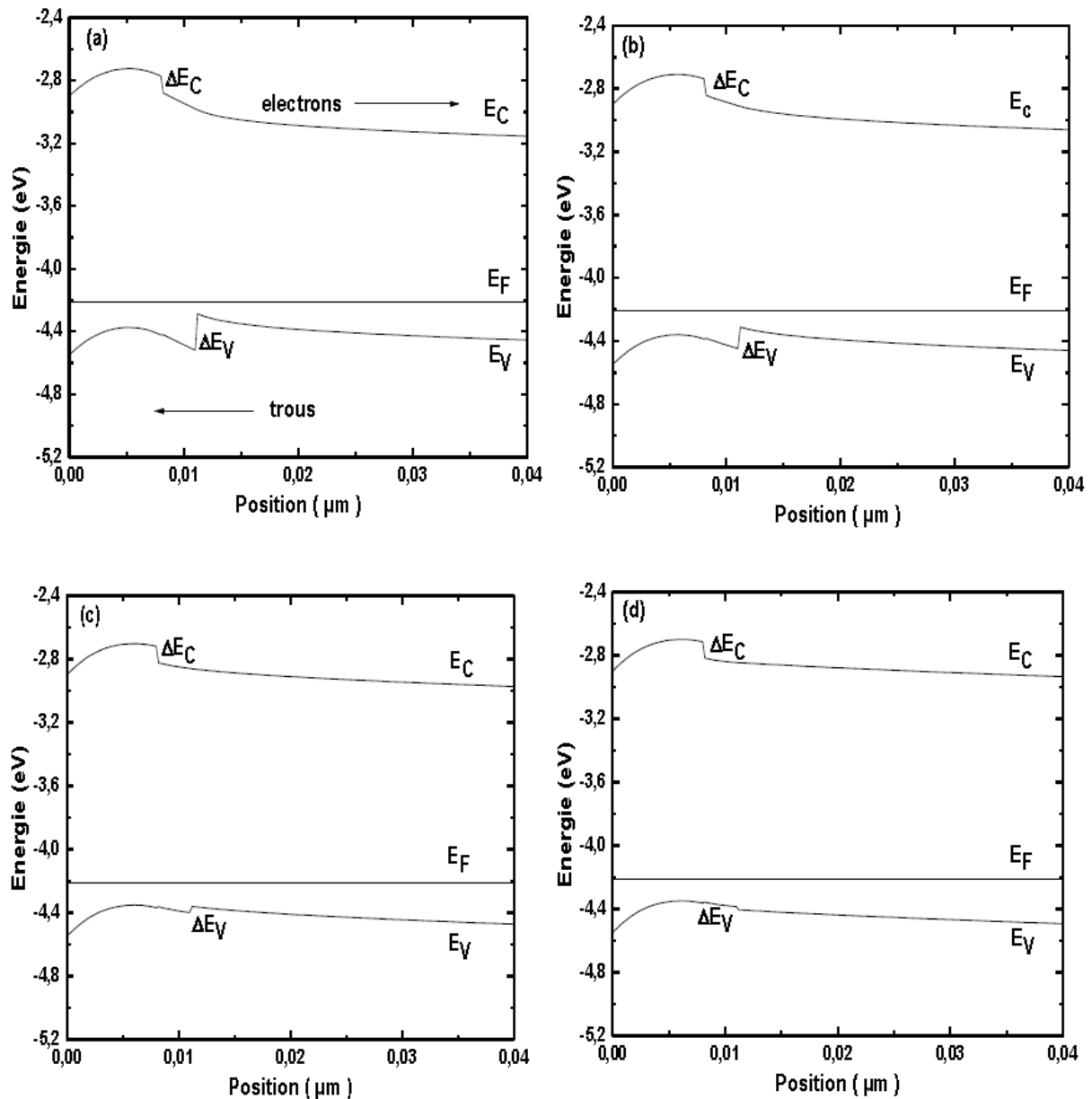


**Figure III.35.** Variation des caractéristiques de la cellule p-i-n en fonction du gap de la couche intrinsèque i-nc-Si:H: (a) le courant de court-circuit  $J_{sc}$ , (b) la tension en circuit-ouvert  $V_{oc}$ , (c) le facteur de forme (FF) et (d) l'efficacité.

Nos calculs, les meilleures performances de la cellule, sont donc obtenus lorsque la valeur du gap de la couche intrinsèque est égale à 1.50 eV.

Pour mieux comprendre l'effet de la variation de la valeur du gap de la couche intrinsèque i-nc-Si:H sur les performances de la cellule p-i-n, nous avons présenté dans la figure III.36 différents diagrammes de bande d'énergie à l'équilibre thermodynamique.

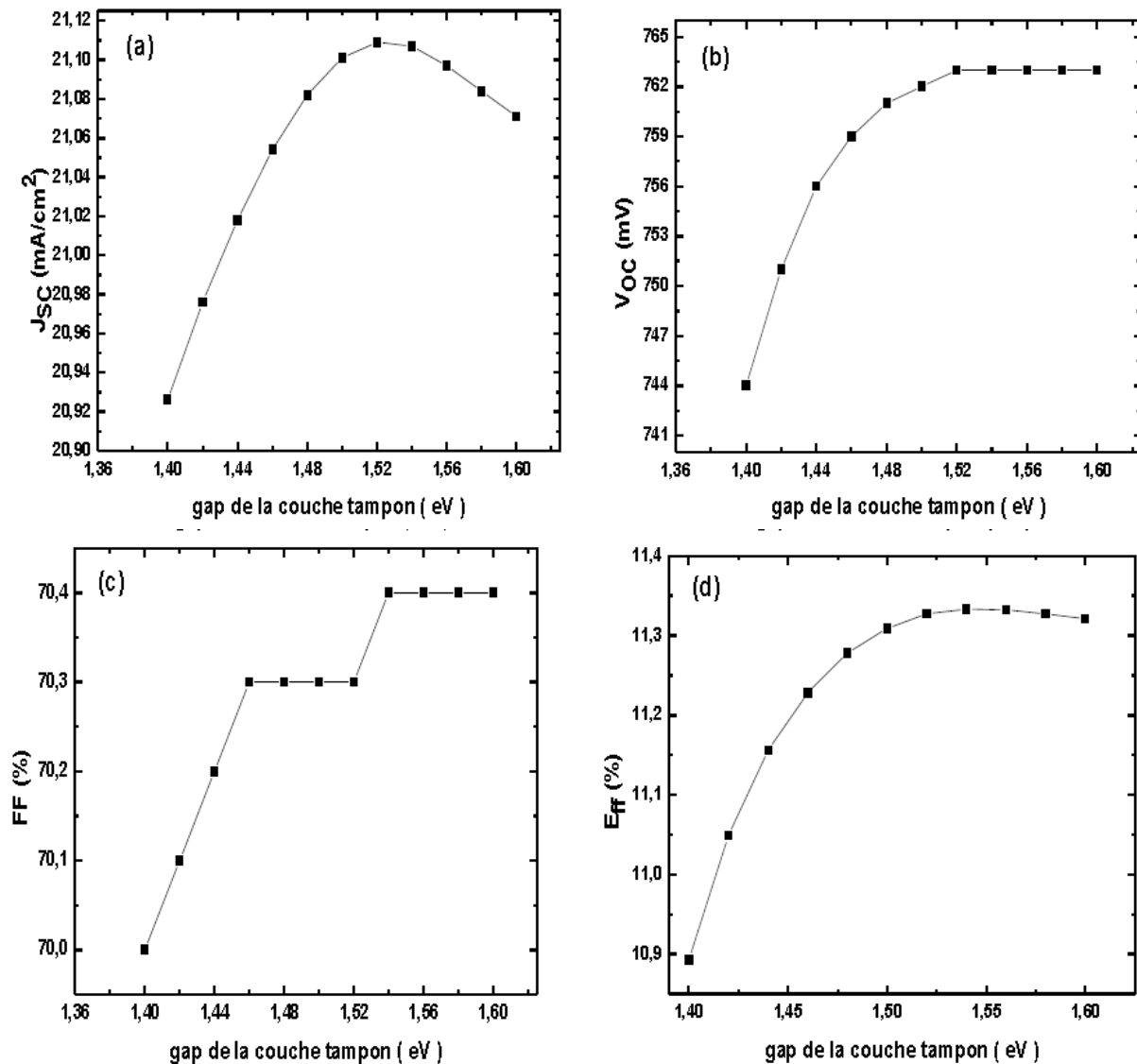




**Figure III.36.** Diagrammes de bande d'énergie de la cellule p-i-n pour différentes valeurs du gap de la couche intrinsèque i-nc-Si:H: (a)  $E_g = 1.3$  eV, (b)  $E_g = 1.4$  eV, (c)  $E_g = 1.5$  eV, (d)  $E_g = 1.56$  eV.

### c. Effet du gap de la couche tampon i-nc-Si:H

Pour étudier l'effet du gap de la couche tampon sur les performances de la cellule p-i-n, nous avons fait varier la du gap de cette couche de 1,4 eV jusqu'à 1,6 eV. En fixant les épaisseurs de p à 14 nm, i tampon à 3 nm, de n à 10 nm et de i-active à 1900 nm. Pour les gaps, nous avons choisi pour la couche fenêtre p 1.7 eV, pour la couche i active 1.5 eV et pour n 1.8 eV. La figure III.37 montre la variation des paramètres de sortie de la cellule en fonction du gap de la couche tampon i-nc-Si:H.



**Figure III.37.** Variation des caractéristiques de la cellule p-i-n en fonction du gap de la couche tampon: (a) le courant de court-circuit  $J_{sc}$ , (b) la tension en circuit-ouvert  $V_{oc}$ , (c) le facteur de forme (FF) et (d) l'efficacité.

La figure III.38 représente la variation de la réponse spectrale avec l'augmentation du gap de la couche tampon i-nc-Si:H. On constate, que la réponse spectrale dans la région de courte longueur d'onde, comprise entre 350 nm et 600 nm et très peu affectée par l'augmentation du gap de la couche tampon.

Pour comprendre en profondeur l'effet de la variation de la valeur du gap de la couche tampon i-nc-Si:H sur les performances de la cellule p-i-n, nous avons tracé différents diagrammes de bande d'énergie à l'équilibre thermodynamique. Les résultats de nos calculs sont montés dans la figure III.39.

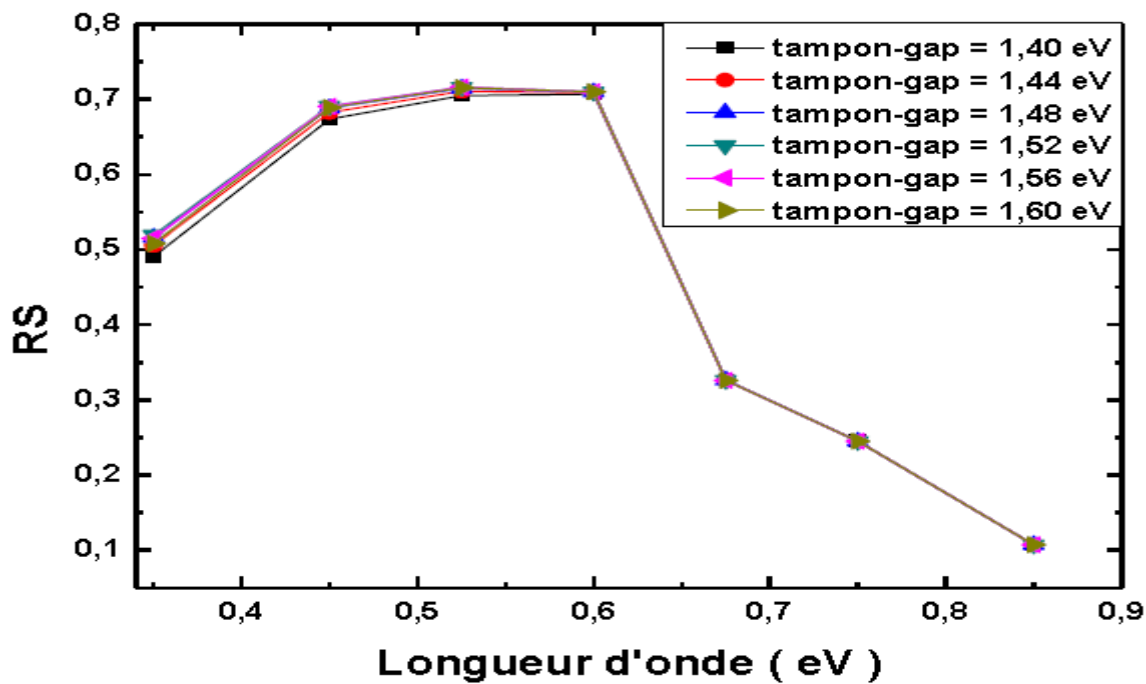


Figure III.38. Variation de la réponse spectrale de la cellule p-i-n en fonction du gap de la couche tampon i-nc-Si:H.

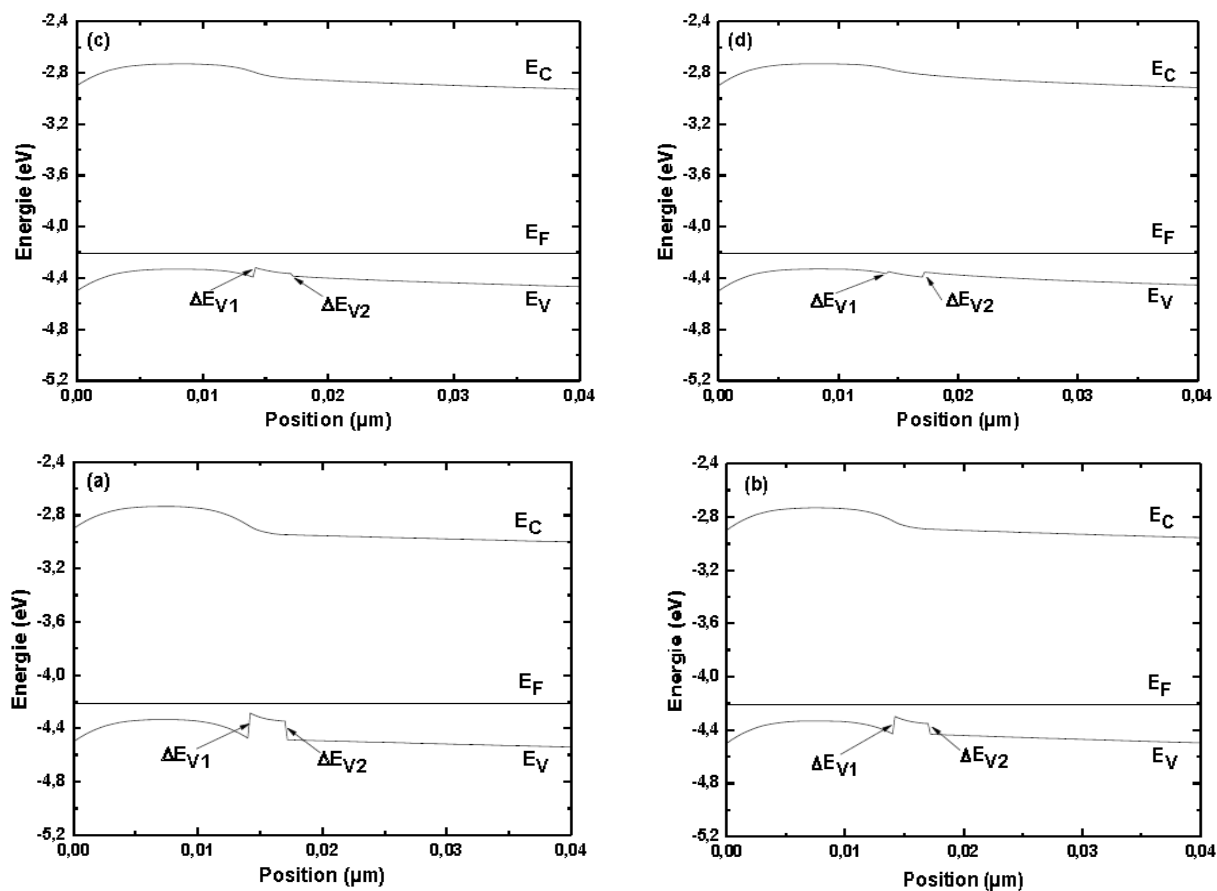


Figure III.39. Diagrammes de bande d'énergie de la cellule p-i-n pour différentes valeurs du gap de la couche tampon i-nc-Si:H: (a)  $E_g = 1.4$  eV, (b)  $E_g = 1.46$  eV, (c)  $E_g = 1.52$  eV, (d)  $E_g = 1.58$  eV.

## 8. Conclusions

L'objectif de ce chapitre porte sur l'étude des propriétés optiques et électroniques des nano fils Si, Si/Ge, Ge/Si et la comparaison entre les trois structures. Ainsi que la fabrication et l'étude de cellules solaires a nano fils de silicium cristallin nous ont montré que les assemblées de nano fils de silicium à jonctions radiales combinent l'avantage d'une grand absorption, et celui d'un relâchement de la contrainte de pureté électronique du matériau pour obtenir une bonne collecte des porteurs photo génères.

Les résultats obtenus nous montrent qu'avec l'intégration des nano fils de Si graduel il y'a une augmentation appréciable du rendement électrique.

Il y a donc une augmentation des photons incidents et par la suite une augmentation du rendement.

Une cellule solaire de type p-i-n à base de silicium nanocristallin hydrogéné (nc-Si:H) a été étudiée, grâce à une modélisation détaillée, par le code AMPS-1D. Notre objectif était de déterminer l'effet de l'épaisseur et de l'énergie de la bande interdite sur les performances de la cellule d'une part et de trouver l'ensemble des paramètres structurels caractérisant chaque couche constituant la structure.