الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE MOHAMED SEDDIK BENYAHIA JIJEL

Faculté des sciences et de la technologie

Département d'Électronique

 N° :...../2022

MEMOIRE DE MASTER

DOMAINE: Sciences et Technologies

FILIERE: Électronique

SPECIALITE: Microélectronique

Thème

Étude et simulation d'une cellule photovoltaïque à base de silicium nanocristallin : effet des propriétés électroniques de la couche active

Présenté Par : BOUCHELAGHEM Amira zohor

Encadré Par : Dr.HAOUES Hakim

MERIAI Fatma zohra

Pr. BOURIDAH Hachemi

Date de soutenance:11/07/2022

Jury de Soutenance

Président : KEMIH Karim Examinateur:BEGHOUL Mahmoud Grade : Professeur Grade: MCA UnivMSB jijel Univ MSB Jijel

Promotion: 2021 /2022



Remerciements

Nous remercions Dieu, en premier lieu, de nous avoir donné le courage et la volonté de réaliser ce modeste travail.

C'est avec chaleur et sympathie que nous tenons à remercier nos encadrants, sans qui ce mémoire n'aurait jamais pu voir le jour. Tout d'abord, nous souhaitons exprimer notre profonde gratitude à monsieur Hachemi Bouridah, Professeur à l'université de Jijel pour sa compétence, son ouverture d'esprit, ses efforts intenses, et sa disponibilité permanente. Ensuite, monsieur Hakim Haoues que nous remercions vivement pour son encadrement efficace, ses grandes aides et ses encouragements tout au long de cette période.

Nos vifs remerciements vont également aux messieurs les membres de jury pour l'honneur qu'ils nous ont fait en acceptant de juger notre travail.

Nos plus chaleureux remerciements vont à l'ensemble des enseignants de l'université de Jijel durant ces cinq années pour leurs conseils et leurs soutiens.

Que tout ceux qui ont contribué à l'élaboration de ce mémoire, soient assurés de notre profonde reconnaissance.







Le fruit de mes années d'étude est dédié

À qui je dois ce que je suis aujourd'hui, à mes chers parents, qui m'ont toujours poussé et motivé pour aller jusqu'au bout, aucun mot ne saurait exprimer mon amour et ma gratitude. Je vous remercie pour vos sacrifices consentis, et vos encouragements.

À mes frères que j'adore, qui ont toujours été présents pour moi.

À mes très chères cousines chacune par son nom, qui m'ont supportée dans les moments de doute, et qui m'ont prêté main forte quand j'en avais besoin.

À tous mes amies, en particulier Rayane et Amira pour leurs encouragements permanents et leur soutien moral.

À ma grande famille ; Bouchelaghem et Mati.

À toute la promo 2022 du 2^{ème} master microélectronique.

BOUCHELAGHEM Amira Zohor



Je dédie ce modeste travail à:

Mes parents, aucun hommage ne pourrait être à la hauteur de l'amour dont ils ne cessent de me combler. Que Dieu leur procure bonne santé et longue vie.

À Mes chers frères, sœurs et leurs enfants source de joie et de bonheur.

À toute ma famille source d'espoir et de motivation.

À tous ceux qui me sont très chers

À tous mes amies et mes collègues qui nous ont accordé leur soutien dans les instants les plus difficiles.

A mes enseignants et tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce mémoire.

Meriai fatma zohra

Sommaire

Liste des figures	
Liste des tableaux	
Introduction générale	2
I Chapitre I	5
I.1 Introduction	5
I.2 La nanotechnologie	5
I.2.1 Notions sur la nanotechnologie	5
I.2.2 Propriétés des nanocristaux de silicium	5
I.3 Du silicium massif au silicium nanocristallin	7
I.3.1 Propriétés physiques de silicium massif	7
I.3.2 Structure cristalline du silicium	7
I.3.3 Nanostructures de silicium et effet de confinement quantique	8
I.4 Méthodes d'obtention des nanocristaux de silicium	10
I.4.1 Implantation ionique	11
I.4.2 Dépôt chimique en phase vapeur	11
I.4.3 Pulvérisation cathodique	12
I.4.4 Ablation laser	13
I.4.5 Procédé Sparc	13
I.4.6 Recristallisation de silicium amorphe	14
I.4.7 Les nanocristaux de silicium dans une matrice diélectrique	14
I.5 Méthodes de caractérisation des nanocristaux de silicium	15
I.5.1 Caractérisation électrique par la méthode des quatre pointes	15
I.5.2 Diffraction des rayons X	16
I.5.3 Microscopie électronique à balayage	17
I.5.4 Microscopie électronique à transmission	17
I.5.5 Spectrophotométrie Infrarouge à Transformée de Fourier	18
I.5.6 Spectroscopie de photoluminescence	19
I.5.7 Spectroscopie Raman	20
I.6 Applications du silicium nanocristallin	21
I.6.1 Applications en microélectroniques	21
I.6.2 Applications optoélectroniques	22

I.6.3	3 Applications photovoltaïques	. 22
I.7	Conclusion	. 22

II	Chap	itre II			
II	.1	Introduction	roduction		
II	.2	Notions géne	érales sur le rayonnement solaire25		
II.2.1		Rayonne	ement solaire		
	II.2.2	Le coeff	icient Air-Masse		
Π	.3	Notions sur l	a cellule solaire27		
Π	.4	Les semi-cor	nducteurs		
	II.4.	Energie	de gap		
	II.4.2	Dopage	des semi-conducteurs		
II	.5	La jonction I	PN		
II	.6	L'effet photo	ovoltaïque		
II	.7	Paramètres d	e la cellule photovoltaïque		
	II.7.	Caracté	istique courant / tension		
	II.7.2	Courant	de court circuit I _{cc}		
II.7.3		Tension	de circuit ouvert V _{co}		
II.7.4		Puissance	ce débitée P 32		
II.7.5		Facteur	de forme (fill factor) FF		
	II.7.	Rendem	ent de conversion η		
II.7.7		Rendem	ent quantique EQE		
	II.7.8	Indice d	e réfraction		
	II.7.9	Coeffici	ent d'absorption		
Π	.8	Modélisatior	a électrique d'une cellule photovoltaïque34		
II	.9	Influence de	quelques paramètres extérieurs sur le rendement		
	II.9.	Influenc	e de la température		
	II.9.2	Influenc	e de l'éclairement		
II.9.3		Influenc	e des résistances série et parallèle		
Π	.10	Avantages et	inconvénients de l'énergie photovoltaïque		
	II.10	.1 Avantag	ges		
	II.10	.2 Inconvé	nients		
Π	.11	Différentes g	générations de cellules photovoltaïques		

II.11	1 Cellules de première génération	. 39
II.11	2 Cellules de deuxième génération	.40
II.11	3 Cellules de troisième génération	.41
II.12	Conclusion	. 42

III.1 In	troduction	45
III.2 In	fluence des effets quantiques sur les paramètres des nanocristaux	45
III.2.1	Influence de la taille sur la constante diélectrique	45
III.2.2	Influence de la taille sur la bande interdite :	
III.2.3	Influence de la taille sur l'affinité électronique :	47
III.3 Ca	lcul de la mobilité des porteurs de charge	
III.3.1	La mobilité des porteurs de charge dans le silicium cristallin	
III.3.2	La mobilité des porteurs de charge du silicium nanocristallin :	50
III.4 Et	ude d'une cellule photovoltaïque en hétérojonction	51
III.4.1	Diagramme de bandes d'énergie	
III.4.2	Expression du potentiel de diffusion	
III.4.3	Expressions des largeurs de zone de charge d'espace	
III.4.4	Expression de la densité du courant	55
III.5 Si	mulation numérique d'une cellule solaire par SCAPS	55
III.5.1	Description du logiciel SCAPS	55
III.5.2	Fonctionnement du logiciel	
III.5.3	Présentation de la structure de la cellule PV étudiée :	60
III.5.4	Simulation de la cellule solaire étudiée pour les différentes tailles des	
nanocr	istallites	
III.5.5	Etude des paramètres influant sur les performances de la cellule solaire.	73
III.6 Co	onclusion	
Conclusion	générale	81
Bibliograph	ie	83

Liste des figures

Chapitre I

Figure I. 1: Elargissement des fonctions d'onde des porteurs de charge dans	10
Figure I. 2 : Schéma du processus de fabrication de nanostructures de Si	11
Figure I. 3 : un réacteur CVD [21].	12
Figure I. 4 : Schéma représentatif de la méthode de pulvérisation	12
Figure I. 5 : schéma principe de l'ablation laser [4].	13
Figure I. 6 : Schéma représentatif du principe de la méthode	16
Figure I. 7 : Réflexion des rayons X par une famille de plans réticulaires	17
Figure I. 8 : Dispositif expérimental de principe d'un spectromètre Microscopie	18
Figure I. 9 : Schéma d'un spectromètre infrarouge à transformée	19
Figure I. 10 : a) Dispositif expérimental de mesure de PL et b) Emission de photon	lors de la
Photoluminescence	20
Figure I. 11 : Dispositif expérimental de principe d'un spectromètre	21
Figure I. 12 :schéma d'une mémoire flash à grille flottante[32]	21

Chapitre II

Figure II. 1 : répartition spectrale du rayonnement solaire [3]	25
Figure II. 2 : Normes de mesures du spectre d'énergie lumineuse émis par le soleil,	26
Figure II. 3 : représentation en coupe d'une cellule photovoltaïque [3]	27
Figure II. 4 : Schéma qui représente l'énergie du gap d'un semi-conducteur [7]	28
Figure II. 5 : Représentation d'un schéma de bandes d'énergie d'une jonction PN [9]	30
Figure II. 6 : la caractéristique courant-tension.	31
Figure II. 7 : les différentes zones de la caractéristique courant-tension	32
Figure II. 8 : schéma équivalent d'une cellule solaire.	36
Figure II. 9 : l'influence de la température sur la caractéristique I(V) [14]	37
Figure II. 10 : l'influence de l'éclairement sur la caractéristique I(V) [14]	37
Figure II. 11 : l'influence de la résistance série sur la caractéristique I(V) [14]	38
Figure II. 12 : l'influence de la résistance parallèle sur la caractéristique I(V) [14]	38
Figure II. 13 : Organigramme représentant les différentes générations de cellules	
photovoltaïques	40

Chapitre III

Figure III. 1: Permittivité en fonction de la taille des nanocristallites	46
Figure III. 2 : Energie de gap en fonction de la taille des nanocristallites	47
Figure III. 3 : Affinité électronique en fonction de la taille des nanocristallites	49
Figure III. 4 : Mobilité des porteurs de charge de silicium monocristallin en fonction de	la
concentration de dopage.	50

Figure III. 5 : Diagramme de bandes d'énergie d'une hétérojonction P/N à l'équilibre	
thermodynamique	52
Figure III. 6 : Interface principale de SCAPS	57
Figure III. 7 : Panneau de définition de la cellule	58
Figure III. 8 : Panneau de définition des paramètres.	58
Figure III. 9 : Panneau de sélection des caractéristiques à simuler.	59
Figure III. 10 : Panneau de lancement de la simulation	59
Figure III. 11 : Panneau d'affichage des courbes.	59
Figure III. 12 : Panneau de définition des propriétés du substrat	61
Figure III. 13 : Panneau de définition des propriétés de la couche nanocristalline	61
Figure III. 14 : Structure de la cellule PV étudiée.	62
Figure III. 15 : Caractéristiques I-V pour une taille des nanocristallites 4nm.	65
Figure III. 16 : Caractéristiques I-V pour une taille des nanocristallites 6nm.	68
Figure III. 17 : Caractéristiques I-V pour une taille des nanocristallites 8nm.	71
Figure III. 18 : Variation du rendement en fonction du dopage pour trois tailles de	
nanocristallites	72
Figure III. 19 : Variation du facteur de forme en fonction du dopage pour trois tailles d	le
nanocristallites	72
Figure III. 20 : Rendement de la cellule en fonction d'épaisseur du substrat	74
Figure III. 21 : Facteur de forme de la cellule en fonction d'épaisseur du substrat	75
Figure III. 22 : Rendement de la cellule en fonction de la résistance série.	76
Figure III. 23 : Variation du facteur de forme de la cellule en fonction	77
Figure III. 24 : Rendement de la cellule en fonction de dopage du substrat	78
Figure III. 25 : Facteur de forme de la cellule en fonction de dopage du substrat	79

Liste des tableaux

Tableau III. 1 : Paramètres de simulation pour une taille des nanocristallites 4nm	63
Tableau III. 2 : Résultats de simulation pour une taille des nanocristallites de 4nm	64
Tableau III. 3 : Paramètres de simulation pour une taille des nanocristallites 6nm	66
Tableau III. 4 : Résultats de simulation pour une taille des nanocristallites de 6nm	67
Tableau III. 5 : Paramètres de simulation pour une taille des nanocristallites 8nm	68
Tableau III. 6 : Résultats de simulation pour une taille des nanocristallites de 8nm	70
Tableau III.7 : Résultats de simulation pour la variation d'épaisseur du substrat	73
Tableau III. 8 : Résultats de simulation pour la variation de la résistance.	76
Tableau III. 9 : Résultats de simulation pour la variation du dopage du substrat	78



Introduction générale

L'expansion du nano monde s'est accélérée d'année en année et le nombre des recherches dans ce domaine accroissent également, car les nanotechnologies sont considérées comme des outils puissants permettant d'étudier de nouvelles méthodes d'exploitation et de stockage d'énergie.

Le silicium est le matériau principal de notre temps et la réduction de sa taille à l'échelle nanométrique offre de nouvelles propriétés physiques intéressantes qui sont utilisées dans des dispositifs à base des nanocristaux de silicium pour différentes applications y compris celle du photovoltaïque, afin d'offrir un rendement énergétique plus intéressant que celui du photovoltaïque standard à base de silicium.

La technologie photovoltaïque est basée sur la conversion directe de la lumière du soleil en électricité par une cellule solaire qui est composé de certains matériaux semi-conducteurs. Les propriétés de ces matériaux jouent un rôle très important sur les caractéristiques de la cellule et son rendement. Ce dernier est faible dans les cellules classiques, c'est pourquoi actuellement plusieurs recherches sont mises en jeu pour la découverte de nouveaux matériaux et de nouvelles structures.

Ce travail s'inscrit dans le cadre de l'étude et de la simulation d'une structure à hétérojonction pour une cellule solaire à base du silicium nanocristallin en utilisant l'outil de simulation SCAPS, dans le but de prédire les paramètres optimaux qui contribuent à améliorer les performances de cette cellule solaire.

Ce mémoire englobera trois chapitres :

Le chapitre d'introduction sera dédié à une description des nanocristaux de silicium, leurs propriétés avantageuses, ainsi que leurs méthodes d'élaboration et de caractérisation.

Le second chapitre présentera un état d'art sur la technologie photovoltaïque en commençant par quelques notions sur le rayonnement solaire, l'effet photovoltaïque et les caractéristiques d'une cellule solaire, ensuite nous allons donner un aperçu sur les différentes générations qui peuvent exister.

Le dernier chapitre sera consacré d'une part à l'étude d'une cellule solaire à hétérojonction et d'autre part à la simulation de notre structure, et à travers les interprétations des résultats

obtenus nous déterminerons l'effet des paramètres critiques de la cellule solaire dans le but d'améliorer le rendement.

Enfin, une conclusion englobera le bilan de notre projet et les futures perspectives pour améliorer le travail réalisé.

CHAPITRE



Etat de l'art des nanocristaux de silicium

I Chapitre I

I.1 Introduction

Dans le présent chapitre nous allons nous intéresser à la nanoscience que l'on peut nommer l'électronique de demain et sa progression dans divers domaines. Nous présentons en premier lieu, les propriétés des nanocristaux de silicium ainsi que l'effet de confinement quantique. En second lieu, nous exposons la structure cristalline du silicium et les matrices diélectriques. Les méthodes d'obtention, de caractérisation ainsi que les applications de ces nanoparticules font aussi l'objet de ce chapitre.

I.2 La nanotechnologie

I.2.1 Notions sur la nanotechnologie

La loi de Moore qui décrit la microélectronique depuis plus de 30 ans est encore envisagée pour la décade à venir. Les technologues seront alors capables de réaliser des structures d'une dizaine de nanomètres et même en dessous. Cependant les propriétés macroscopiques appliquées jusqu'à présent ne seront plus applicables pour de telles dimensions. Pour dépasser les barrières physiques qui résulteront de ce passage à l'échelle du nanomètre, il conviendra à utiliser les nouvelles lois physiques au rang desquelles nous pouvons citer le confinement quantique, le blocage de coulomb ou l'effet tunnel [1].

La nanotechnologie vise tout ce qui est de taille nanométrique, elle a fait l'objet durant ces dernières années de très nombreux travaux, au sein de multiples domaines scientifiques ; la physique, la chimie, la biologie, les sciences humaines et sociales. Elle représente une progression considérable vers la miniaturisation des composants permettant une grande densité d'intégration augmentant ainsi la rapidité des systèmes.

La nanoscience connait un développement considérable à cause de l'invention de nouveaux outils d'élaboration, de caractérisation et d'analyse.

I.2.2 Propriétés des nanocristaux de silicium

La matière présente une très grande surface développée. Ainsi, la proportion d'atomes à la surface est importante par rapport à ceux qui sont en volume. Les atomes à la surface sont en réalité très réactifs à cause de leur instabilité, ils ne sont

pas complètement entourés d'atomes ou de molécules. Donc La réduction des dimensions d'une structure cristalline à des grandeurs nanométriques va provoquer des modifications dans ses propriétés structurales, optiques et électroniques [2].

I.2.2.1 Propriétés structurales

Une diminution de la taille du système provoque une augmentation de la surface des objets, ainsi qu'une augmentation de leur énergie libre surfacique, ce qui conduit à des changements dans les espacements interatomiques. Dans les semi conducteurs une diminution de la taille des particules fait accroître l'espacement interatomique [2].

I.2.2.2 Propriétés optiques

Les propriétés optiques dépendent fortement des transitions entre les niveaux d'énergie, la diminution de la taille des composants à un effet considérable sur les énergies de l'orbitale moléculaire supérieure occupée (bande de valence) et de l'orbitale moléculaire inférieure inoccupée (la bande de conduction). Donc dans les semi-conducteurs, les propriétés optiques varient fortement avec la taille des objets [2].

I.2.2.3 Propriétés électroniques

La réduction de la taille du système conduit à des modifications importantes dans les propriétés électroniques reliées essentiellement à l'influence croissante de la rareté des centres de diffusion et la propriété ondulatoire des électrons. A cette échelle, chaque électron à un chemin aléatoire. Cependant, la migration des électrons n'est pas aléatoire lorsque les dimensions du système deviennent très petites devant le parcours moyen d'un électron. Le transport électronique est défini principalement soit par la diffusion avec les impuretés ou avec d'autres porteurs soit par la diffusion aux interfaces rugueuses [2].

Lorsque la taille du système devient comparable à la longueur d'onde de Broglie des électrons, La nature discrète des états d'énergie apparait de nouveau. Dans certains cas, les matériaux conducteurs deviennent isolants au-dessous d'une valeur critique où les bandes d'énergie cessent de se chevaucher A l'échelle macroscopique [2].

I.3 Du silicium massif au silicium nanocristallin

I.3.1 Propriétés physiques de silicium massif

Le silicium a été généralement qualifié de matériau du siècle et sa domination sur l'industrie de la microélectronique depuis plus de 50 ans a été également comparée à celle du fer sur l'industrie métallurgique durant le siècle dernier [3].

Le Si est l'élément le plus abondant de notre planète. C'est un matériau semiconducteur de la famille des cristaux covalents qui possède quatre électrons de valence servant pour établir des liaisons covalentes avec quatre voisins [3].

Dans les matériaux semi-conducteurs, la luminescence est le phénomène de recombinaison radiative des électrons de la BC et des trous de la BV à travers la bande interdite. Lors d'une transition électronique entre le bas de la BC et le haut de la BV (recombinaison), ou l'inverse (adsorption), il doit y avoir une conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement [4].

Lorsqu'un électron de la BV est excité électriquement ou optiquement, il vient peupler la BC, créant ainsi un trou dans la BV. Cette paire électron-trou peut se recombiner en émettant un photon (recombinaison radiative). Dans le cas d'un semiconducteur à gap direct, la recombinaison des paires électron-trou a une forte probabilité. Dans le cas du silicium qui présente une structure de bande d'énergie du type indirecte, la recombinaison d'un électron de la BC et d'un trou de la BV doit être assistée d'un phonon. L'interaction des phonons est un phénomène lent [5].

La recombinaison des porteurs de charge dans un semi-conducteur à gap indirect se fait suivante des processus non radiatifs et pour cette raison, le Si à l'état massif est considéré comme un matériau médiocre pour l'optoélectronique.

I.3.2 Structure cristalline du silicium

En cristallographie, la structure d'un cristal est décrite par les paramètres de réseau d'une de ses mailles élémentaires, son groupe d'espace et la position des atomes qui lorsque toutes les opérations de symétrie du groupe d'espace seront appliquées sur eux, générant tout le contenu de la maille.

I.3.2.1 Etat cristallin

Un solide cristallin est formé par la répétition périodique d'un motif atomique ou moléculaire (maille) dans les trois dimensions de points régulièrement disposés. Cet

ensemble est nommé réseau cristallin et les points qui le constitue sont appelés nœuds du réseau de l'espace.

I.3.2.1.1 Etat monocristallin

L'arrangement atomique dans cet état se répète d'une façon régulière dans les trois directions de l'espace à travers tout le solide. Cette répétition est identique en termes de composition, orientation et position des atomes.

Dans un cristal idéal de silicium, les atomes sont arrangés selon la structure diamant avec une distance interatomique égale à 2.35 A°. La liaison entre les atomes de Si les plus proches est de caractère covalent. A ce type de liaison correspondent des états électroniques conduisant à des bandes d'énergie permise et interdite pour les électrons. La bande interdite (gap) qui sépare la bande permise inférieure (BV) de la bande permise supérieure (BC) est égale à Eg=1.12 ev à température ambiante.

I.3.2.1.2 Etat polycristallin

L'arrangement dans le polysilicium comporte plusieurs orientations qui se juxtaposent les unes aux autres. C'est une structure intermédiaire entre les deux états extrêmes amorphe et monocristallin. Le silicium polycristallin est formé de grains monocristallins séparés entre eux par des zones désordonnées et riches en défauts cristallins que l'on appelle joints de grains ; le grain est décrit par sa taille et par sa qualité cristalline, le joint de grain est caractérisé par ses dimensions (son épaisseur et sa densité des défauts).

I.3.2.2 Etat amorphe

Le silicium amorphe est une forme non cristalline du silicium, sa structure atomique n'est pas régulière. Grace à une certaine distribution de la distance interatomique et de l'angle de liaison, des distorsions apparaissent dans le réseau provoquant une distribution des états électroniques et formant des queues de bande.

I.3.3 Nanostructures de silicium et effet de confinement quantique

La réduction de la taille des cristaux de silicium à l'échelle du nanomètre a un impact significatif sur les propriétés électroniques des matériaux. Où les propriétés du Si-nc sont en fait dues aux effets de confinement quantique causés par la localisation spatiale des porteurs de charge dans le Si-nc [6].

Pour chaque exciton créé dans un semi-conducteur, on associe une taille caractéristique appelé rayon de Bohr excitonique. Si la taille des nc-Si est très petite par rapport au rayon de Bohr excitonique (~ 5 nm), l'exciton dans ce cas est confiné dans un espace limité. On peut décrire en mécanique quantique cet espace comme une boîte quantique. Ainsi, le confinement spatial provoque un élargissement de la distribution des vecteurs d'onde, des électrons et des trous, et alors une localisation des niveaux d'énergie en maison de la relation d'incertitude de Heisenberg [7].

En première approximation, les puits et les boites quantiques sont décrits comme des puits de potentiel avec une barrière d'énergie infinie. Considérant une particule libre de masse effective m confinée dans un puits de potentiel à une dimension de largeur d, les vecteurs d'onde permis pour la particule sont définis par l'approximation des masses effective. Donc les niveaux d'énergie discrets pour les porteurs libres confinés sont [7]:

$$E_n = E_g + \frac{K_n^2 \cdot h^2}{2 \cdot m^*}$$
(I.1)

$$K = \frac{n \cdot \pi}{d} (n = 1, 2, 3...)$$
(I.2)

$$E_{n} = E_{g} + n^{2} \cdot \frac{\pi^{2} \cdot h^{2}}{2 \cdot d^{2}} \left(\frac{1}{m_{e}^{*}} + \frac{1}{m_{h}^{*}} \right)$$
(I.3)

- Eg : l'énergie de gap du matériau massif.
- h : la constante de Planck réduite.
- me: les masses effectives des électrons.

m_h : les masses effectives des trous.



Figure I. 1: Elargissement des fonctions d'onde des porteurs de charge dans Le silicium Confiné [8].

Lorsque la taille des particules diminue la largeur de la bande interdite augmente et les fonctions d'onde des porteurs de charge s'élargissent, permettant de contrôler la longueur d'onde des photons émis lors de la recombinaison et augmentant les probabilités de recombinaison radiative [8].

I.4 Méthodes d'obtention des nanocristaux de silicium

Parmi les méthodes principales permettant la nano-structuration de silicium on peut citer les suivantes :

- implantation des matrices hôtes par ions de silicium suivi d'un recuit thermique [9].
- dépôt chimique en phase vapeur de couches d'oxyde non-stœchiométrique SiOx ou des couche SiNx suivi ou non d'un recuit thermique [10].
- pulvérisation cathodique d'un substrat de silicium sous atmosphère oxydante pour former la couche de sub-oxyde suivi d'un recuit thermique [11].
- ablation laser d'un substrat de silicium [12].
- attaque d'un substrat de silicium par des impulsions électriques [13].
- dépôt de clusters de silicium par décomposition du silane (SiH4) [14].
- synthèse de nanostructures sous forme d'aérosol [15].
- recristallisation des couches de silicium amorphe [16].
- Nano-structuration par microscopie à sonde locale [17].

Les méthodes mentionnées ci-dessus seront brièvement décrites par la suite :

I.4.1 Implantation ionique

Le procédé de fabrication des nanocristaux de silicium par implantation ionique est déclenché par l'implantation d'ions de Si⁺ réalisée dans une couche SiO₂ pré-déposée ou thermiquement développé sur un substrat de Si. Ce procédé est suivi d'un recuit thermique à des températures au-delà de 900°c et qui dure plus de 100minutes pour assurer une bonne séparation des phases du système Si/SiO₂ vers du Si et SiO₂ [18], et au final on obtient des nanostructures de silicium. Cette méthode permet en outre de placer un certain nombre d'ions à une certaine profondeur avec des changements de dose et d'énergie des ions implantée [19].

Cette technique est utilisée généralement dans les applications optiques. La figure (I. 2) illustre un Schéma du processus de fabrication de nanostructures de Si par implantation ionique [20].



Figure I. 2 : Schéma du processus de fabrication de nanostructures de Si par implantation ionique.

I.4.2 Dépôt chimique en phase vapeur

Les méthodes CVD sont multiples (LPCVD : Low Pressure Chemical Vapor Deposition, PECVD (Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition...etc.) et elles sont différentes les unes des autres selon le procédé d'initiation des réactions chimiques et selon les conditions du dépôt [19]. La méthode CVD est une méthode d'obtention des nanocristaux de silicium qui consiste à le déposer sur une couche fine isolante (SiO₂ ou Si₃N₄) à une température autour de 600°C en utilisant les gaz précurseurs(SiH₄), en tant que source d'atomes de silicium, mélangé avec de l'azote N₂ ou de l'ammoniac NH₃, pour obtenir des atomes d'azote.

Ce processus assure un bon contrôle de la densité et de la taille des nc-si déposés. L'illustration de cette technique est schématisée sur la Figure (I. 3).



Figure I. 3 : un réacteur CVD [21].

I.4.3 Pulvérisation cathodique

Le principe de cette méthode est basé sur un champ magnétique aux abords de la cathode qui est une cible composée du matériau à déposer, généré par un magnéton placé derrière cette source de dépôt (la cible). Les particules chargées sont alors contraintes à l'intérieur du champ magnétique et le plasma est localisé à la surface de la cible, permettant un rendement de pulvérisation plus important.

La couche subit ensuite un recuit pour provoquer la précipitation de nanoparticules.

Pour obtenir les nanostructures de Si par cette technique, deux méthodes sont utilisées. La première méthode implique l'utilisation de deux cibles (SiO₂+Si) placées dans la même chambre avec un substrat de silicium sous atmosphère d'argon, alors que La deuxième méthode implique l'utilisation d'une seule cible (Si) placée dans la même chambre avec le substrat Si mais cette fois-ci sous atmosphère Ar/O₂. Dans les deux cas, le résultat de dépôt est une couche d'oxyde non-stœchiométrique SiO_x (1<x<2).

Le contrôle de la distribution de taille des Si-ncs est plutôt médiocre et le rendement de luminescence est assez faible dans cette technique [11].



Figure I. 4 : Schéma représentatif de la méthode de pulvérisation

cathodique [21].

I.4.4 Ablation laser

La figure (I. 5) présente le principe de cette technique, qui est basé sur l'utilisation d'un faisceau de laser focalisé sur une cible rotative, Les impulsions du laser permettent la vaporisation de matériaux sous forme de plasma. Le panache de matière se condense sur un substrat placé de façon perpendiculaire à la cible ou opposé à elle avec une distance de 50mm. La condensation du matériau issu permet d'obtenir les nanostructures. L'avantage de ce procédé est le dépôt à température ambiante qui permet le revêtement sur tous types des substrats [4].



Figure I. 5 : schéma principe de l'ablation laser [4].

I.4.5 Procédé Sparc

L'obtention de Si-nc par cette technique est simple. Le système est constitué d'une électrode placée typiquement à une distance de 1mm d'un substrat de Si. Une certaine quantité d'impulsions électriques est appliquée pendant une durée de temps déterminée à hautes fréquence (quelques KHz) et à haute tension (quelques KV) qui provoqueront la formation d'une couche dont l'aspect et la structure sont très semblables à ceux du SP. Dans cette technique la distribution de taille est aléatoire et se contrôle difficilement, tandis que le rendement de luminescence est médiocre [21].

I.4.6 Recristallisation de silicium amorphe

Le principe de cette technique est le recuit rapide d'une couche de Si amorphe préalablement déposée par le procédé PECVD ou sputtring. Le recuit rapide à une température comprise entre 800°C et 900°C assure la coalescence des nanocristaux. Après ce recuit on continue par un deuxième recuit dans un four traditionnel avec une rampe constante de température de ~10°K/mm entre 600°C et 1050°C pour relaxer les contraintes entre les deux phases ncs-Si/matrice et améliorer la passivation de la surface des ilots. La recristallisation de la couche amorphe se fait typiquement dans des périodes de temps inférieurs à 60 s de recuit rapide. Cette technique permet d'obtenir des distributions de taille contrôlable avec limitation de la taille minimale des nc-Si (~2.5nm) à cause du stress. En plus, le rendement de luminescence est faible [16].

I.4.7 Les nanocristaux de silicium dans une matrice diélectrique

Les nc-Si enfouies dans une matrice diélectrique sont aujourd'hui le sujet de nombreuses applications envisagées, en particulier, dans le domaine du photovoltaïque [6].

C'est naturellement la matrice oxyde de silicium (SiO₂) qui a suscité le plus de recherches du fait de sa très bonne stabilité thermique et de ses excellentes propriétés de passivation [6].

I.4.7.1 Les nc-Si dans une matrice SiO_x

Le principe de base pour obtenir des nanocristaux de silicium dans une matrice de SiO₂ consiste à obtenir des excès de silicium à l'intérieur de celle-ci. Ces films peuvent être obtenus par implantation de silicium dans de l'oxyde de silicium ou par

dépôt d'oxyde sous-stœchiométrique obtenu par des techniques de dépôt sous vide. Ces dépôts sont généralement suivis de traitements thermiques à hautes températures (T>900°C) pour permettre la formation des nanocristaux de silicium [6].

La distribution de tailles est difficilement comparable entre les techniques étant donnée la difficulté à récolter des informations précises et fiables à ce sujet. Néanmoins, on peut dire qu'elles conduisent généralement à des dispersions de tailles des nanoparticules importantes. Les techniques MET par perte d'énergie sont très prometteuses pour la caractérisation de ncs-Si. Elles ont permis de mettre en évidence la morphologie complexe des ncs-Si dans le SiO₂ [6].

I.4.7.2 Les ncs-Si dans une matrice SIN_X

Le nitrure de silicium est une option intéressante pour des applications photovoltaïques et plus généralement pour l'optoélectronique, à cause de sa barrière de potentiel (5,3 ev) qui est moins élevée que celle du SiO₂ (9 ev). Il est utilisé généralement comme couche antireflet pour ses propriétés de passivation [6].

Le principe de base pour obtenir des nc-Si dans une matrice du nitrure de silicium consiste premièrement à obtenir un film SiN riche en silicium (NSRS), Les films NSRS peuvent être élaborés par des techniques de dépôt sous vide. Le processus de dépôt est généralement suivi par des traitements thermiques à hautes températures mais elle est plus faible que celle d'oxyde de silicium (700°C) afin d'obtenir des ncs-Si. En effet, la taille des nc-Si dépendent de la température de recuit et de la stœchiométrie [6].

I.5 Méthodes de caractérisation des nanocristaux de silicium

La caractérisation des structures à base de Si-nc est un enjeu important pour l'étude de leurs propriétés. Ces techniques issues de la microélectronique, comme la microscopie électronique, la spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier, et la diffraction des rayons X, sont largement reconnues et utilisées directement ou indirectement pour comprendre les diverses propriétés de ces structures. Cependant, ces techniques nécessitent une préparation particulière des échantillons, leur sensibilité est limitée pour l'identification des nanocristaux [21].

I.5.1 Caractérisation électrique par la méthode des quatre pointes

C'est une méthode simple et rapide qui mesure la résistivité des couches minces. Elle est basée sur l'utilisation de quarte sondes équidistantes en contact direct avec la surface de l'échantillon, placées soit linéairement, soit sous forme d'un carré. Le principe de la mesure est simple, il suffit d'injecter un courant (I) aux deux pointes extrêmes et de mesurer la tension (V) au niveau des deux pointes internes. Puis, en exploitant la loi d'Ohm, nous pouvons déterminer directement la résistance carrée pour ensuite déduire la valeur de la résistivité [22].



Figure I. 6 : Schéma représentatif du principe de la méthode des quatre pointes [19].

I.5.2 Diffraction des rayons X

La diffraction des rayons X est une technique non destructive d'analyse pour la caractérisation structurale des matériaux cristallins. Cette technique est employée pour l'étude de poudres composées de cristaux de façon aléatoire. Cette technique permet d'obtenir des informations structurales comme les phases cristallines, la taille, l'orientation des cristallites et les paramètres de maille [23].

La diffractométrie de rayons X est basée sur l'interaction élastique d'un faisceau monochromatique de photons X avec la matière cristallisée. La méthode générale

consiste à bombarder l'échantillon avec des rayons X dont des longueurs d'onde comprises entre 0.07 nm et 0.2 nm. La diffraction résultante aboutit à l'obtention d'un diffractogramme et permet la détermination des distances réticulaires des plans de diffraction [24].



Figure I. 7 : Réflexion des rayons X par une famille de plans réticulaires espacés d'une distance [24].

I.5.3 Microscopie électronique à balayage

La Microscopie électronique à Balayage (MEB) est une technique de microscopie électronique basée sur le principe des interactions électrons-matière, capable de produire des images en haute résolution de la surface d'un échantillon [19].

Le principe de fonctionnement d'un MEB est basé sur l'interaction entre l'échantillon à analyser et un faisceau d'électron, ce dernier produit par un filament de tungstène chauffé à haute température est accéléré vers l'anode grâce à une haute tension.

En venant percuter l'échantillon, plusieurs radiations sont produites simultanément telles que les électrons secondaires, les électrons primaires, les électrons rétrodiffusés, les électrons Auger ou encore les rayons X. la nature de la détection désirée est basée sur le type des électrons récoltés [23].

I.5.4 Microscopie électronique à transmission

La microscopie électronique en transmission est une technique puissante d'analyse pour la caractérisation structurale, morphologique et chimique d'échantillons solides à l'échelle atomique qui peut être utilisé pour imager les nanostructures. Le MET fonctionne sur le même principe que la microscopie optique avec des différences liées à la longueur d'onde réduite du faisceau électronique comparé à la lumière visible. Et Pour permettre la transmission des électrons à travers l'échantillon, Les échantillons étudiés doivent donc préalablement amincis afin d'être transparents aux électrons. , ce qui fait du MET une technique complexe et difficile à mettre en œuvre. Cette technique repose sur l'interaction des électrons avec la matière, la détection des électrons ayant traversé l'échantillon ainsi que tous les signaux résultants de l'interaction électrons-matière permettent d'obtenir des informations sur les propriétés de l'échantillon [23], [26].





I.5.5 Spectrophotométrie Infrarouge à Transformée de Fourier

La Spectroscopie Infrarouge à Transformée de Fourier est une technique non destructive qui permet de déterminer la nature des liaisons présentes au sein d'un matériau et de les quantifier. Cette technique est basée sur l'interaction entre la lumière infrarouge et les états vibrationnels de la matière. Lorsque des atomes se lient

pour former une molécule, plusieurs modes de vibration deviennent alors possibles. La fréquence de vibration de ces modes a tendance à apparaitre dans le domaine infrarouge. Ainsi, chaque bande d'absorption du spectre infrarouge correspond à une vibration ou à une rotation caractéristique d'un dipôle, ce qui rend la FTIR très sensible à la composition chimique des matériaux analysés [23].

L'analyse s'effectue à l'aide d'un spectromètre à transformée de Fourier qui envoie sur l'échantillon un rayonnement infrarouge et mesure les longueurs d'onde auxquelles le matériau absorbe la radiation et les intensités de l'absorption [27].



Figure I. 9 : Schéma d'un spectromètre infrarouge à transformée

Fourier [27].

I.5.6 Spectroscopie de photoluminescence

La spectroscopie de photoluminescence est l'une des techniques de caractérisation optique permettant de caractériser les matériaux semi-conducteurs et les isolants. Elle permet d'étudier les propriétés intrinsèques et extrinsèques du matériau. Mais également de qualifier la qualité cristalline des couches étudiées [19].

Cette méthode est basée sur l'excitation de l'échantillon au moyen d'une source monochromatique afin d'exciter les électrons de la BV vers la BC, à des niveaux d'énergie qu'ils n'occuperaient pas à l'équilibre thermodynamique. Les électrons photo-excités relaxent vers les bords des bandes ou les centres radiatifs avant de se recombiner pour revenir à un niveau d'énergie plus bas tout en émettant un photon. En théorie, la PL peut être utilisés pour déterminer le gap optique d'un matériau pour vu que l'énergie d'excitation soit assez grande pour exciter un électron de BV vers la BC [28].

Toutefois, la PL observée peut aussi provenir de défauts présents dans la couche dont les niveaux d'énergie se situent plus bas que les bords des bandes. La conséquence est alors un décalage entre l'énergie d'émission et l'énergie du seuil d'absorption appelé décalage de stokes [29].



Figure I. 10: a) Dispositif expérimental de mesure de PL.

b) Emission de photon lors de la Photoluminescence [28].

I.5.7 Spectroscopie Raman

La spectroscopie Raman est une technique d'analyse basée sur l'étude de la diffusion inélastique de la lumière en interaction avec un matériau. L'effet Raman résulte de transitions vibrationnelles dues à l'interaction entre photons provenant d'une source de lumière monochromatique et les atomes de l'échantillon étudié. [30].

Ce spectre représente l'intensité de la lumière diffusée en fonction du décalage en énergie par rapport à la longueur d'onde de la lumière incidente. Le spectre Raman du Silicium cristallin massif est caractérisé par un pic intense et étroit à 520 cm⁻¹ qui correspond aux modes phonons transverses optiques. Pour des nanostructures de Silicium de faible dimension, ce pic se décale vers les faibles nombres d'onde. Les calcules d'Albens et al ont montré qu'un effet de confinement de phonons pouvait conduire à une fréquence de vibration de 504 cm⁻¹. Pour interpréter les spectres

Raman des ncs-Si, le modèle le plus utilisé est le modèle phénoménologique de confinement de phonons [31]

Les informations apportées par la spectroscopie Raman sont relativement étendues [19]:

- Identification de phases ou de composés chimiques ;
- Caractérisation des matériaux ;
- Détermination de la structure moléculaire ;
- Étude des systèmes amorphes et cristallins.



Figure I. 11 : Dispositif expérimental de principe d'un spectromètre

Raman [19].

I.6 Applications du silicium nanocristallin

Les applications des nanocristaux de silicium sont nombreuses et touchent divers domaines, à savoir, la microélectronique, l'optoélectronique et le photovoltaïque.

I.6.1 Applications en microélectroniques

Dans la microélectronique les propriétés avantageuses du silicium nanocristallin ont permis d'évoluer de nouvelles technologies dans le domaine de la microélectronique tel que les transistors MOS (Metal Oxide Semiconductor) qui sont considérés comme la base des circuits électroniques. Au fur et à mesure que latechnologie progresse, le nombre de transistors par puce augmente (passe d'un millier à plusieurs millions) et les tailles sont réduites.

La mémoire flash à nanocristaux est l'application la plus prometteuse du silicium nanocristallin en microélectronique, la technologie Flash utilise des structures simples à base de transistor MOS qui possède une couche de poly silicium enfouie dans l'oxyde de grille, entre la grille de contrôle et le canal (grille flottante) [32].



Figure I. 12 :schéma d'une mémoire flash à grille flottante [32].

I.6.2 Applications optoélectroniques

En optoélectronique le silicium a des propriétés optiques non intéressantes, d'ailleurs il a été considéré comme un matériau inadéquat pour les applications de ce domaine à cause de son gap indirect. En revanche l'utilisation des nanocristaux de silicium permet de passer d'un gap indirect à un gap pseudo direct dont la largeur dépend de la taille des nanocristaux.

I.6.3 Applications photovoltaïques

Dans le photovoltaïque : les cellules photovoltaïques sont des composants qui, sous illumination, convertissent l'énergie des photons absorbés en énergie électrique. Les photons sont absorbés dans une couche semi-conductrice en générant une paire électron-trou. Cette paire doit se séparer et chaque porteur doit atteindre les électrodes pour fournir un courant électrique.

La fabrication des cellules solaires peut être réalisée en utilisant de multiples matériaux semi-conducteurs, la principale caractéristique de ces matériaux est leur gap optique qui définit leur spectre d'absorption. Plus le gap est petit, plus le nombre de photons absorbés est grand, mais plus la tension du circuit externe est faible. Au contraire, plus le gap est grand, plus la tension du circuit est élevée cependant le nombre de photons absorbés est faible et le courant généré est par conséquence faible. Il apparaît donc nécessaire de trouver un moyen pour ajuster la valeur du gap afin que la puissance générée, soit la plus élevée possible.

Pour cela, des axes de travail fondé sur des nouveaux mécanismes physiques liés au développement de la nanotechnologie sont apparus. Les nanocristaux de silicium présentent un intérêt particulier en raison de l'abondance du silicium, de l'expérience assimilée sur ce matériau et du coût relativement faible en énergie des procédés de dépôt de couches minces de Si. De plus, en utilisant le silicium nanocristallin, les énergies de bande interdite sont ajustables selon la taille des nanoparticules du silicium en raison de l'effet de confinement quantique permettant de meilleurs rendements.

Parmi les nombreuses approches utilisant des nanostructures de silicium, on peut citer les cellules à bande intermédiaire, les cellules à multi-génération de porteurs ou les cellules à porteurs chauds [19].

I.7 Conclusion

Au cours de ce chapitre consacré à la nanotechnologie à base de silicium, nous avons exposé un état de l'art sur les nanocristaux de silicium en termes de ses propriétés et de ses méthodes d'élaboration. Nous nous sommes aussi intéressés aux matrices diélectriques. Il s'avère que la specifité de la morphologie des nanocristaux élargie ses domaines d'applications, d'obtentionet de caractérisations.





Notions sur les cellules photovoltaïques

II Chapitre II

II.1 Introduction

Dans ce chapitre nous présenterons des notions fondamentales sur le photovoltaïque, Nous exposons en premier quelques notions sur le rayonnement solaire, les semi-conducteurs et la jonction PN, et nous décrirons ensuite les cellules solaires avec leurs caractéristiques électriques et leurs différentes générations.

II.2 Notions générales sur le rayonnement solaire

II.2.1 Rayonnement solaire

Les calculs et les mesures par satellite montrent que la terre qui est située à environ 150 millions de kilomètres du soleil - reçoit une valeur moyenne du flux solaire à la limite supérieure de l'atmosphère terrestre, sa valeur est estimée à 1367 W/m^2 , c'est ce qu'on appelle la constante solaire [33].

Le rayonnement émis par le soleil est constitué d'ondes électromagnétiques dont une partie parvient constamment à la limite supérieure de l'atmosphère terrestre. En raison de la température superficielle du soleil (environ 5800 K), ce rayonnement électromagnétique se situe dans la gamme de longueur d'onde de la lumière visible (entre 0,4 et 0,75µm) et dans le proche infrarouge (au-delà de 0,75 et jusqu'à 4µm environ), et (<0,4µm) pour les rayons ultraviolets [34].



Figure II. 1 : répartition spectrale du rayonnement solaire [35].
II.2.2 Le coefficient Air-Masse

Lorsque la lumière traverse une plus grande épaisseur d'air crée une perte d'énergie solaire par l'absorption atmosphérique ce qu'on appelle le coefficient de la masse d'air, ce coefficient représente la distance parcourue par la lumière pour atteindre son point d'impact, cette grandeur est indiquée par l'abréviation ''AM'' suivi d'un nombre, son expression est donnée par :

$$AM = \frac{1}{\sin \alpha} \tag{II.1}$$

Avec:

α: la distance zénithale du soleil exprimée en degrés ou l'angle que fait la direction du soleil avec le zénith.

On définit :

AM 0 : spectre solaire hors atmosphère, ce spectre est utilisé pour les applications spatiales (satellites et véhicules spatiaux) [36].

AM 1 : correspond au chemin optique minimal, où le soleil est perpendiculaire à la surface de la terre avec un angle de 90° .

AM 1.5 : utilisée pour tester les cellules solaires sous un éclairement de 1000W/m² et une température de 25°C(les conditions test standards ''STC'') avec un angle de 41.8° sur la surface de la terre.





Figure II. 2 : Normes de mesures du spectre d'énergie lumineuse émis par le soleil, Notion de la convention AM [37].

II.3 Notions sur la cellule solaire

La cellule solaire est un composant électronique fabriquée à partir des matériaux semi-conducteurs. Elle présente l'élément de base d'un module photovoltaïque qui convertit l'énergie solaire (photons) en énergie électrique par un phénomène appelé effet photovoltaïque.



Figure II. 3 : représentation en coupe d'une cellule photovoltaïque [35].

II.4 Les semi-conducteurs

Un semi-conducteur est un matériau intermédiaire entre un métal et un isolant. La conductivité d'un semi-conducteur est très faible par rapport aux métaux. Donc il peut être classé comme un isolant mais il pourra devenir aussi un conducteur de l'électricité sous certaines conditions.

Dans un semi-conducteur, les niveaux de plus basse énergie correspondent à des électrons fortement liés aux atomes, ces niveaux s'appellent aussi bande de valence. Pour déplacer ces électrons aux niveaux de conduction et participent à la conduction du courant, il faudra leur fournir une énergie supérieure ou égale à l'énergie de gap de matériau, en chauffant, éclairant ou en appliquant un potentiel électrique à ses bornes[38].

Une méthode chimique appelée dopage des semi-conducteurs peut également être utilisée pour réguler la conductivité des électrons.

II.4.1 Energie de gap

Pour que les électrons puissent se déplacer de la dernière couche (la bande de valence (E_v)) vers la bande de conduction (E_c) , ils doivent recevoir une énergie supérieure ou égale à l'énergie de gap (E_g) . Ce dernier est l'espace entre la bande de valence et la bande de conduction. L'unité d'Eg est électronvolts (ev) et son expression est la suivante :

$$E_g = E_c - E_v \tag{II.2}$$



Figure II. 4 : Schéma qui représente l'énergie du gap d'un semi-conducteur [39].

II.4.2 Dopage des semi-conducteurs

Un semi-conducteur dopé est appelé semi-conducteur extrinsèque, et pour obtenir ce dernier, on y rajoute des atomes pentavalentes ou trivalentes en petites quantités à une substance pure comme le silicium intrinsèque, cette action permet de modifier ses propriétés électriques, optiques ou structurales. Le dopage de semi-conducteur peut être de deux types :

II.4.2.1 Semi-conducteur dopé de type N

Le dopage des semi-conducteurs type N consiste à insérer au réseau cristallin des atomes de type donneur qui possèdent cinq électrons de valence (pentavalent), dans le but d'augmenter la concentration des électrons libres.

II.4.2.2 Semi-conducteur dopé de type P

Le dopage des semi-conducteurs type P consiste à insérer au réseau cristallin des atomes de type accepteur qui possèdent trois électrons de valence (trivalent), dans le but d'augmenter la concentration des trous.

II.5 La jonction PN

La jonction PN résulte de la juxtaposition de deux semi-conducteurs de type de dopage différent, l'un ayant un dopage de type P et l'autre ayant un dopage de type N. On appelle homojonction quand les deux semi-conducteurs sont de même matériau, et dans le cas contraire on parlera d'une hétérojonction.

Lorsque les deux régions sont mises en contact, les électrons et les trous diffusent spontanément de part et d'autre de la jonction. Ces électrons et ces trous vont alors se recombiner dans l'interface, laissant une zone très étroite vidée de ses porteurs majoritaires et pleine d'ions immobiles. On appelle cette zone la zone de charge d'espace(ZCE). Cependant, ce mécanisme de vidage des porteurs majoritaires n'est pas infini. La ZCE contient d'un côté des ions positifs et de l'autre des ions négatifs. Il en résulte la création d'une différence de potentiel de jonction qui vient freiner puis stopper le mouvement de fuite des porteurs majoritaires [40].



Figure II. 5 : Représentation d'un schéma de bandes d'énergie d'une jonction PN [41].

II.6 L'effet photovoltaïque

L'effet photovoltaïque fait référence à la capacité de certains matériaux, notamment les semi-conducteurs, à convertir la lumière du soleil en énergie électrique. Cet effet fut découvert pour la première fois par le physicien Français Edmond Becquerel en 1839[42].

Les cellules PV sont formées de jonctions PN qui permettent une séparation spatiale des électrons et des trous dus aux changements de potentiel électrochimique au sein de la structure. Si l'énergie des photons atteignant la cellule solaire est supérieure à celle de la bande interdite du matériau, Une paire électron-trou photo-générée dans la zone de charge d'espace (ZCE) est immédiatement dissociée par le champ électrique : les trous sont accélérés vers la région p et les électrons vers la région N, nous avons un photo-courant de génération.

Dans la région N ou P, les porteurs minoritaires photo-générés diffusent et ceux qui atteignent la zone de charge d'espace sont poussés dans leur régions étant majoritaires, nous avons un photo-courant de diffusion. Ces deux contributions s'additionnent pour donner le photo-courant résultant I_{ph} qui est le courant des porteurs minoritaires proportionnel à l'intensité lumineuse.

Ce phénomène est basé sur les trois principes suivants : [36]

- Absorption optique du photon d'énergie supérieure ou égale à celle de la bande interdite et génération d'une paire électron-trou dans le semi-conducteur;
- Séparation de la paire électron-trou dans le semi-conducteur ;
- Collection des charges dans un circuit électrique.

II.7 Paramètres de la cellule photovoltaïque

II.7.1 Caractéristique courant / tension

La caractéristique I(V) décrit les prouesses de la cellule photovoltaïque, elle représente la variation du courant produit par la cellule en fonction de la tension à ses bornes sous obscurité et sous éclairement. Cette caractéristique détermine les paramètres de la cellule (le rendement, facteur de forme).



Figure II. 6 : la caractéristique courant-tension.

On peut regrouper trois zones essentielles [35] :



Figure II. 7 : les différentes zones de la caractéristique courant-tension.

La zone 1: le courant reste constant quelle que soit la tension. Pour cette région, le générateur photovoltaïque fonctionne comme un générateur de courant.

La zone 2: correspondant au coude de la caractéristique. La région intermédiaire entre les deux zones précédentes, représente la région préférée pour le fonctionnement du générateur, où le point optimal (caractérisé par une puissance maximale) peut être déterminé.

La zone 3: qui se distingue par une variation de courant correspondant à une tension presque constante. Dans ce cas, le générateur est similaire à un générateur de tension.

II.7.2 Courant de court circuit I_{cc}

C'est le courant produit par la cellule solaire lorsque ses bornes sont courtcircuitées c'est-à-dire à tension nulle. Il est proportionnel à l'éclairement et dépend principalement de la mobilité des porteurs de charge. Pour une cellule solaire idéale: $I_{cc} = I_{ph} (V=0)$.

II.7.3 Tension de circuit ouvert V_{co}

La tension de circuit ouvert indique la tension maximale fournie par la cellule solaire lorsque le courant qui la traverse est nul, elle n'est pas vraiment proportionnelle à l'intensité lumineuse. Cette tension est donnée par l'expression suivante :

$$V_{co} = \frac{k.T}{q} \log \left(\frac{I_{ph}}{I_s} + 1 \right)$$
(II.3)

II.7.4 Puissance débitée P

La puissance produite par la cellule photovoltaïque est donnée par la relation suivante :

$$P = V.I \tag{II.4}$$

Avec:

P : Puissance débitée par la cellule en Watts.

V : Tension aux bornes de la cellule en Volts.

I : Courant qui circule dans la cellule en Ampères.

Cette puissance est maximale au point de fonctionnement P_m qui a comme cordonnées : I_m (courant correspondant à la puissance maximale) et V_m (tension correspondante à la puissance maximale :

$$P_m = V_m . I_m \tag{II.5}$$

II.7.5 Facteur de forme (fill factor) FF

Il s'agit d'un paramètre très important qui détermine la qualité de la cellule, il est défini par la relation suivante :

$$FF = \frac{P_m}{V_{co} . I_{cc}} = \frac{V_m . I_m}{V_{co} . I_{cc}}$$
(II.6)

La conversion photoélectrique sera meilleure lorsque la valeur de ce facteur est élevée.

II.7.6 Rendement de conversion η

C'est le paramètre qui évalue les performances d'une cellule, il exprime le rapport entre la puissance délivrée par la cellule et la puissance du rayonnement solaire incident et se définit comme suit :

$$\eta = \frac{P_m}{P_{in}} = \frac{FF \cdot V_{co} \cdot I_{cc}}{P_{in}}$$
(II.7)

Avec

Pin : la puissance du rayonnement solaire incident.

II.7.7 Rendement quantique EQE

Ce paramètre décrit la qualité et la quantité de la conversion photovoltaïque dans la cellule solaire. Il représente le rapport entre le nombre d'électrons dans le circuit externe et le nombre de photons incidents. Lorsque les photons perdus par réflexion et ceux qui sont transmis (absorption incomplète) ne sont pas pris en compte, cette valeur s'appelle le rendement quantique interne, IQE (Internal Quantum Efficiency). Dans le cas contraire, le rendement quantique externe, EQE (External Quantum Efficiency), il s'exprime selon la relation suivante :

$$EQE = \frac{I_{cc}}{q.\varphi} \cdot \frac{h.c}{\lambda}$$
(II.8)

Avec:

Icc: Courant court-circuit.

- φ : Flux lumineux incident.
- q : La charge de l'électron.
- h: constante de Planck.
- c: vitesse de la lumière.

 λ : longueur d'onde.

II.7.8 Indice de réfraction

L'expression de l'indice de réfraction est donnée par :

$$N_r = \sqrt{\varepsilon_r} \tag{II.9}$$

Avec :

 ε_r : la permittivité relative.

II.7.9 Coefficient d'absorption

Le coefficient d'absorption est extrêmement crucial, en particulier pour les cellules solaires, car il détermine combien de photons sont absorbés et combien de porteurs sont créés. Autrement dit, c'est la quantité de lumière absorbée. L'absorption dans une couche semi-conductrice est exprimée par le terme suivant [43] :

$$\alpha(\lambda) = \frac{4.\pi.k}{\lambda} \tag{II.10}$$

II.8 Modélisation électrique d'une cellule photovoltaïque

Le schéma électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque consiste une source de courant pour modéliser la conversion du flux de lumière en énergie électrique et délivre un courant photogénéré I_{ph} , une résistance de dérivation R_{sh} qui modélise les fuites grâce à l'effet de bord autour de la cellule solaire, une résistance série R_s qui tient compte des contacts ohmiques entre le métal et le semi-conducteur, et une diode parallèle pour modéliser la jonction PN.

Le circuit électrique équivalent est schématisé par la figure II.8 :



Figure II. 8 : schéma équivalent d'une cellule solaire.

Le courant fourni par la cellule photovoltaïque s'écrit :

$$I = I_{ph} - I_s \left[\exp\left(\frac{q(V+R_s.I)}{n.k.T}\right) - 1 \right] - \frac{V+R_s.I}{R_{sh}}$$
(II.11)

Avec:

V: tension aux bornes de la cellule.

R_{sh}: résistance parallèle.

R_s: résistance série.

II.9 Influence de quelques paramètres extérieurs sur le rendement

II.9.1 Influence de la température

La température est un paramètre atmosphérique qu'influe sur le comportement de la cellule photovoltaïque ainsi sur son rendement. La figure (II.9) présente l'influence de la température sur la caractéristique I(V), où on observe une légère augmentation du courant du court-circuit et une diminution de la tension en circuit ouvert :



Figure II. 9 : l'influence de la température sur la caractéristique I(V) [44].

II.9.2 Influence de l'éclairement

L'éclairement est le paramètre le plus influant sur la cellule solaire. La figure (II.10) présente l'influence de l'éclairement sur la caractéristique I(V), où on observe que la tension en circuit ouvert ne change pas vraiment, par contre le courant du court circuit varie avec l'accroissement de l'éclairement :





II.9.3 Influence des résistances série et parallèle

Les résistances parasites exercent une influence sur le comportement de la cellule.

II.9.3.1 Résistance série

La figure (II.11) montre l'influence de la résistance série sur la caractéristique I(V) de la cellule solaire, où on constate que l'augmentation de la résistance série ne modifie pas la tension en circuit ouvert et le courant du court circuit, par contre ça déforme la caractéristique ce qui fait chuter la pente :



Figure II. 11 : l'influence de la résistance série sur la caractéristique I(V) [44].

II.9.3.2 Résistance parallèle

La figure (II.12) montre l'influence de la résistance parallèle sur la caractéristique I(V) de la cellule solaire, où on constate que la tension de circuit ouvert et le courant de court-circuit sont inchangés, cependant la caractéristique se déforme ce qui provoque une augmentation de la pente :



Figure II. 12 : l'influence de la résistance parallèle sur la caractéristique I(V) [44].

II.10 Avantages et inconvénients de l'énergie photovoltaïque

Comme toutes les énergies renouvelables, l'énergie photovoltaïque présente un grand nombre d'avantages et d'inconvénients [44].

II.10.1 Avantages

- une haute fiabilité ;
- le caractère modulaire des panneaux photovoltaïques permet une installation simple et adaptable à divers besoins énergétiques ;
- le coût de fonctionnement très faible ;

38

• c'est une énergie non polluante et silencieuse.

II.10.2 Inconvénients

- La technologie de fabrication des modules photovoltaïques est élevée, nécessite un investissement coûteux ;
- Le rendement de conversion réel du module est faible ;
- Prend beaucoup de place pour les grandes installations ;
- Il existe encore de nombreux problèmes avec le stockage de l'énergie électrique;
- Lorsque l'énergie électrique doit être stockée sous forme chimique (batterie), les coûts du générateur augmentent.

II.11 Différentes générations de cellules photovoltaïques

Il existe plusieurs technologies de cellules qui ont toutes des propriétés différentes. Les cellules photovoltaïques les plus répandues sont constituées de semi-conducteur qui est capable de conduire l'électricité [35]. Dans ce qui suit, on va présenter les principales générations photovoltaïques :

- La première génération de cellules photovoltaïques est en silicium cristallin. Toutefois, la fabrication de ces cellules, très coûteuse, a toujours constitué un frein au développement de cette source d'énergie.
- La deuxième génération de cellules photovoltaïques vise à réduire les coûts de production
- La troisième génération à été conçue pour améliorer les performances de rendement [19].

La figure II.13 montre un organigramme représentant les différentes générations des cellules solaires :



Figure II. 13 : Organigramme représentant les différentes générations de cellules photovoltaïques.

II.11.1 Cellules de première génération

Le silicium représente le deuxième élément le plus abondant sur terre après l'oxygène et qui peut être considéré comme inépuisable [45]. Les cellules cristallines se subdivisent en deux catégories : mono- et poly- cristalline selon le type de structure. Ces deux types de cellules proviennent de procédé de purification et de solidification différents.

II.11.1.1Les cellules à base de Silicium monocristallin

Le silicium mono cristallin est difficile à obtenir. En effet, il nécessite un taux de pureté très élevé et donc plusieurs étapes de purification. Les cellules monocristallines ont un taux de rendement excellent (16 à 24%) mais leur méthode de production est laborieuse et délicate, et donc, très chère ; il faut une grande quantité d'énergie pour obtenir du cristal pur [46].

II.11.1.2Les cellules à base de Silicium poly-cristallin

Le silicium multi cristallin (Poly-cristallin) est devenu aujourd'hui la technologie la plus utilisée. Elle représente près de 50% du marché. Il est produit par des techniques de croissance qui assurent la formation d'une structure colonnaire avec de gros cristaux (dénommé silicium multi-cristallin) afin de limiter les effets néfastes des joints de grains [47].

Les cellules poly-cristallines ont un coût de production moins élevé et un rendement qui varie de 14% à 18% [46].

II.11.2 Cellules de deuxième génération

La deuxième génération des cellules repose sur la déposition de matériaux semiconducteurs en couches minces. Ces matériaux sont déposés par des procédés tels que PE-CVD (Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition) sur un substrat. L'épaisseur de la couche varie entre quelques nanomètres à des dizaines de micromètres [48]. Parmi les technologies en couches minces On distingue trois types de cellules :

II.11.2.1 Les cellules à base de Silicium amorphe

Les cellules solaires à base de silicium amorphe sont fabriquées en déposant une ou plusieurs couches minces sur un substrat de verre. Il est moins couteux et moins polluant que la génération précédente et fonctionne avec un faible éclairement. De plus, Ces cellules possèdent un très faible rendement, de l'ordre de 5% à 8% et subissent une perte de rendement durant les premiers mois de leurs utilisation (phénomène de ''stabilisation sous lumière''). De plus ces cellules ont des durées de vie plus courte que ceux de silicium cristallin (environ 10 ans) et leurs processus de fabrication ne sont pas bien maîtrisés [49].

II.11.2.2Le tellurure de cadmium CdTe

Le matériau le plus prometteur est le tellure de cadmium (CdTe) qui offre la possibilité de produire des modules à des coûts plus faibles [50]. L'avantage de ces cellules réside dans la forte absorption du tellurure de cadmium, cependant la toxicité du matériau freine le développement de cette technologie. Les meilleures cellules à base de CdTe présentent des rendements de photo conversion de l'ordre de 17% [51].

II.11.2.3Les cellules à base de Cuivre indium sélénium (CIS) / Cuivre indium Gallium sélénium (CIGS)

Les cellules CIS/CIGS présentent un fort potentiel de développement dans le futur avec des rendements de plus de 20% en laboratoire. Cependant, les matériaux nécessaires à la fabrication de ce type de cellule ne sont pas disponibles en grande quantité [52].

Ces matériaux sont stables sous rayonnement et ont de très bonnes propriétés d'absorption. Ce type de cellules présente un faible coût de fabrication [51].

II.11.3 Cellules de troisième génération

La troisième génération des cellules a pour objectif d'augmenter le rendement.

II.11.3.1 Cellules photovoltaïques organiques

Les cellules photovoltaïques organiques sont considérées comme une nouvelle technologie basée sur les colorants et leurs propriétés physiques et optiques [46].

Contrairement aux cellules à base des matériaux inorganiques, ces cellules offrent beaucoup d'avantages tels que: la possibilité d'être déposée en grande surface, la facilité de fabrication et de manipulation, la possibilité de les réaliser sur des substrats flexibles, et grâce à des coûts de fabrication et des matériaux plus faibles, ces cellules devraient dans l'ensemble revenir beaucoup moins cher que leurs concurrentes. Elles possèdent en revanche des durées de vie inférieures à celle des cellules inorganiques, et des rendements de conversion plus faibles (5 %) [53].

II.11.3.2 Cellules photovoltaïques Tandem

II.11.3.2.1 Cellules multi-jonctions

Les cellules multi-jonctions sont composées d'un grand nombre de semiconducteurs (GaAs, Ge, GaInP2...) possédant chacun un spectre limité, de telle sorte que le choix des matériaux dont les longueurs d'onde limites soient les plus proches possible les unes des autres. On obtient ces cellules multi-jonctions à partir de différentes couches minces, ce qui permet d'optimiser le travail d'absorption et obtenir un meilleur rendement, atteignant 50%. Le plus grand défaut de ces cellules est leur coût de fabrication, car aucune production industrielle n'a encore pu être mise en place. Ces cellules limitent les pertes d'énergie car il suffit d'utiliser des systèmes à plusieurs niveaux, en empilant des jonctions possédant des gaps décroissants. Ainsi, il est possible d'exploiter le spectre solaire dans sa quasi-totalité avec des rendements de conversion très importants [37].

II.11.3.2.2 Cellules solaires à hétérojonction

Les cellules solaires à hétérojonction à base des nanocristaux font l'objet de nombreuses recherches. Les particules nanocristallines offrent en effet des avantages uniques, elles augmentent notamment l'efficacité de la conversion en énergie des radiations solaires, résistent aux radiations et se transportent très facilement.

II.11.3.3 Cellules photovoltaïques pérovskites

C'est un nouveau type des cellules photovoltaïques, elle n'est pas encore sortie des laboratoires. Cette filière est considérée comme étant la technologie la plus prometteuse des systèmes photovoltaïques solaires récents. Les cellules solaires en pérovskite présentent aujourd'hui une alternative attrayante aux cellules en silicium qui dominent aujourd'hui le marché. Par comparaison entre le silicium et les pérovskites, le premier a besoin de 30 ans pour atteindre le record 25,7%, mais les pérovskites ont besoin que de 6 ans pour atteindre un rendement de 20%. De plus les pérovskites ont une capacité d'absorption des photons 10 fois supérieure à celle du silicium et une bonne séparation des charges électriques et leur mobilité [52].

Malgré ces performances les cellules pérovskites ne peuvent pas concurrencer les cellules à base de silicium car à partir de 40°C elles commencent à se dégrader, et aussi elles deviennent instables lorsque l'humidité dépasse 35%. Donc l'intérêt des chercheurs n'est pas toujours à trouver des meilleurs rendements, mais aussi à améliorer la stabilité de ces cellules [54].

II.12Conclusion

Ce chapitre consiste une revue bibliographique sur le fonctionnement des cellules photovoltaïques, leurs caractéristiques et leurs multiples paramètres. Nous avons également abordé un aperçu sur toutes les technologies actuellement utilisées dans le domaine du photovoltaïque en définissant les catégories et les types de cellules (1^{ère}, 2^{ème} et 3^{ème} génération). En effet, les cellules de la dernière génération, objet de ce travail s'intéressent à l'amélioration du rendement des structures photovoltaïques à couche active en couche mince.

CHAPITRE



Etude et simulation d'une cellule solaire à hétérojonction

III Chapitre III

III.1 Introduction

Ce chapitre est axé sur l'étude et la simulation des structures photovoltaïques à hétérojonction avec la couche active à base de silicium nanocristallin. Vu la spécifité du silicium à l'échelle nanométrique, il est primordial de calculer l'influence de la taille nanométrique sur certains paramètres physiques que supporte le logiciel de simulation utilisé dans ce travail, à savoir la constante diélectrique, la mobilité, et l'affinité électronique ainsi que l'énergie de gap. Nous abordons par la suite la simulation des cellules photovoltaïques en question par l'utilisation du logiciel SCAPS très adapté à l'étude des structures à hétérojonction. L'étude du rendement est menée en fonction de plusieurs paramètres physiques de la couche nanocristalline et du substrat.

III.2 Influence des effets quantiques sur les paramètres des nanocristaux

Les propriétés physiques d'une nanostructure diffèrent considérablement de celles d'un matériau massif [55].

La constante diélectrique, la bande interdite et l'affinité électronique d'un matériau à base de silicium nanocristallin dépendent toutes de la taille caractéristique des effets quantiques.

Lorsque la taille des matériaux diminue jusqu'à l'échelle du nanomètre, les effets de quantification (quantification de l'énergie, quantification du moment cinétique, etc.) apparaissent et sont principalement dus au confinement des particules dans une, deux ou trois dimensions spatiales (confinement quantique). Cela conduit à l'émergence de nouvelles propriétés et fonctionnalités qui dépendent de la taille.

III.2.1 Influence de la taille sur la constante diélectrique

La constante diélectrique symbolise la propriété du matériau à s'opposer au passage d'un courant électrique. Plus le matériau limite le passage d'un courant électrique est élevée.

Chapitre III: Etude et simulation d'une cellule solaire à hétérojonction

Les travaux de L-W. Wang et al [56] ont présenté un modèle théorique fondé sur des calculs quantiques sur les variations de la constante diélectrique des nanocristaux de silicium. Cette étude montre que la valeur de la constante diélectrique usuelle semblait considérablement réduite dans de telles dimensions par rapport à sa valeur ordinaire. La constante diélectrique d'un point quantique avec une taille des grains Lg est exprimée comme suit [56]:

$$\varepsilon_{nc-si}(L_g) = 1 + \frac{10^4}{1 + \left(\frac{1.38}{10^9 \cdot L_g}\right)^{1.37}}$$
(III.1)

La figure III.1 représente le tracé de la permittivité électrique pour une gamme de tailles des nanocristallites allant de 1nm jusqu'à 10nm :



Figure III. 1: permittivité en fonction de la taille des nanocristallites.

III.2.2 Influence de la taille sur la bande interdite :

L. F. Mao [57] a publié une nouvelle formule pour décrire les effets quantiques liés à la bande interdite dans les nanostructures de silicium, qui s'applique aux tailles allant de 1 à 50 nm. La valeur de l'énergie de la bande interdite usuelle augmente de façon remarquable dans de telles dimensions par rapport à sa valeur régulière. L'expression de L'énergie de la bande interdite d'un point quantique ayant une taille des grains L_g est donnée comme suit [57]:

$$Eg_{nc-si}(L_g) = Eg_a + \frac{3.4382}{10^9}L_g + \frac{1.1483}{(10^9 \cdot L_g)^2}$$
(III. 2)

La figure III.2 représente le tracé de l'énergie de gap pour une gamme de tailles des nanocristallites allant de 1nm jusqu'à 10nm :



Figure III. 2 : Energie de gap en fonction de la taille des nanocristallites.

47

III.2.3 Influence de la taille sur l'affinité électronique :

L'affinité électronique est définie comme la quantité d'énergie nécessaire pour extraire un électron du niveau Ec et l'amener au niveau du vide.

Dmitriy V.Melnikov et James R.chelikowsky [58] ont présentés des calculs de l'affinité électronique pour les nanocristaux de silicium qui montrent que sa valeur diminue dans les dimensions à l'échelle nanométrique par rapport à sa valeur ordinaire. L'expression de l'affinité électronique d'un point quantique ayant une taille des grains L_g est donnée comme suit [58] :

$$q\chi_{nc-si}(L_g) = q\chi_{si} - \frac{23.5}{\left(\frac{10 \cdot L_g}{0.52}\right)^{0.9}}$$
(III. 3)

La figure III.3 représente le tracé de l'affinité électronique pour une gamme de taille des nanocristallites allant de 1nm jusqu'à 10nm :



Figure III. 3 : affinité électronique en fonction de la taille des nanocristallites.

III.3 Calcul de la mobilité des porteurs de charge

III.3.1 La mobilité des porteurs de charge dans le silicium monocristallin

Nous adaptons l'expression proposée par D.M.Caughey et R.E.Thomas pour exprimer la mobilité [59]:

$$\mu = \mu_{\min} + \frac{\mu_{\max} - \mu_{\min}}{1 + \left(\frac{N}{N_{ref}}\right)^{\alpha}}$$
(III. 4)

Avec:

N: densité de dopage.

Type n:

$$\mu_n = 65 + \frac{1330 - 65}{1 + \left(\frac{N}{8 \cdot 5 \times 10^{16}}\right)^{0.72}}$$
(III. 5)

Type p:

$$\mu_p = 47.7 + \frac{495 - 47.7}{1 + \left(\frac{N}{6.3 \times 10^{16}}\right)^{0.76}}$$
(III. 6)



Figure III. 4 : la mobilité des porteurs de charge de silicium monocristallin en fonction de la concentration de dopage.

III.3.2 La mobilité des porteurs de charge du silicium nanocristallin :

Pour la mobilité, nous utilisons la formule proposée par N.Gupta et B.P.Tyagi [60] :

$$\mu_{eff} = \frac{\mu_g}{1 + \left(1 - \frac{L_g}{L}\right) \left(\frac{\mu_g \cdot L_{gb}}{\mu_{gb} \cdot L_g}\right) \cdot \exp\left(\frac{E_b}{k \cdot T}\right)}$$
(III. 7)

Avec:

 μ_g : la mobilité des grains calculée par l'équation (III.6).

 μ_{gb} : la mobilité des joints des grains.

L : longueur totale du film.

L_g: longueur du grain.

L_{gb}: longueur des joints des grains.

E_b: la hauteur de la barrière de potentiel.

k : la constante de Boltzman.

T: température ambiante

III.4 Etude d'une cellule photovoltaïque en hétérojonction

La structure la plus simple d'une cellule photovoltaïque comporte une jonction entre deux zones dopées différemment d'un même matériau semi-conducteur (homojonction) ou entre deux matériaux différents (hétérojonction).

Une hétérojonction est une jonction crée entre deux différents matériaux semiconducteurs et d'énergie de gap différente, de façon que la conversion d'énergie dépend de l'absorption des photons par deux types de semi-conducteurs

Dans le monde de l'industrie et de la recherche photovoltaïque, l'intérêt pour la structure à hétérojonction est en hausse.

Les principaux avantages des cellules solaires à hétérojonction par rapport aux cellules à homojonction sont : une plus grande efficacité, un coût potentiellement inférieur par rapport aux autres technologies et une bonne absorption de la lumière.

En conséquence, les rendements des cellules photovoltaïques dans les hétérojonctions sont sensiblement plus élevés que ceux des cellules dans l'homojonction.

III.4.1 Diagramme de bandes d'énergie

Le diagramme énergétique d'une hétérojonction P/N à l'équilibre thermodynamique est représenté sur la figure (III.5) :



Figure III. 5 : Diagramme de bandes d'énergie d'une hétérojonction P/N à l'équilibre thermodynamique.

NV₁: niveau du vide au voisinage du 1^{er} semi-conducteur (Si-nc).

NV₂: niveau du vide au voisinage du 2^{ème} semi-conducteur (Si-c).

 E_{g1} : énergie de gap du 1^{er} semi-conducteur (Si-nc).

 E_{g2} : énergie de gap du $2^{\grave{\mathrm{e}}\mathrm{me}}$ semi-conducteur (Si-c).

 E_{c1} : bande de conduction du 1^{er} semi-conducteur (Si-nc).

 E_{c2} : bande de conduction du 2^{ème} semi-conducteur (Si-c).

 E_{v1} : bande de valence du 1^{er} semi-conducteur (Si-nc).

 E_{v2} : bande de valence du 2^{ème} semi-conducteur (Si-c).

E_F: niveau de fermi.

 ΔE_{fp} : distance entre E_f et E_v .

 ΔE_{fn} : distance entre E_c et E_f .

 Δ_{Ec} : discontinuité des bandes de conduction.

 Δ_{Ev} : discontinuité des bandes de valence.

 $q\chi_1$: affinité électronique des nanocristaux de silicium.

 $q\chi_2$: affinité électronique du silicium cristallin.

 $q\phi_1$: travail de sortie des nanocristaux de silicium.

 $q\phi_2$: travail de sortie du silicium cristallin.

qV_d: différence d'énergie potentielle entre les deux niveaux du vide.

III.4.2 Expression du potentiel de diffusion

D'après le diagramme de bandes d'énergie :

$$qV_d + q\chi_2 + \Delta E_{f_n} = Eg_1 - \Delta E_{fp} + q\chi_1$$
(III. 8)

Sachant que:

$$\Delta E_{fn} = k.T \log \left(\frac{N_c}{N_{d2}} \right)$$
(III. 9)
$$\Delta E_{fp} = k.T \log \left(\frac{N_v}{N_{a1}} \right)$$
(III. 10)

(III. 10)

53

Avec :

k : constante de Boltzman.

T : température ambiante(K).

N_c: densité d'états effectifs dans la BC.

N_v: densité d'états effectifs dans la BV.

 Na_1 : concentration des trous dans le 1^{er} semi-conducteur.

 Nd_2 : concentration des électrons dans le 2^{ème} semi-conducteur.

Donc, le potentiel de diffusion est donné par :

$$V_{d} = \frac{Eg_{1}}{q} - \frac{k.T}{q} \log \left(\frac{N_{c} \cdot N_{v}}{N_{a1} \cdot N_{d2}} \right) - \Delta \chi$$
(III. 11)

III.4.3 Expressions des largeurs de zone de charge d'espace

En utilisant l'équation de poisson, on a pu obtenir l'expression du potentiel électrique dans chacun des semi-conducteurs [40].

• Pour le 1^{er} semi-conducteur : On a:

$$V_{1}(x) = \frac{q \cdot N_{a1}}{2\varepsilon_{1}} (x + x_{p})^{2} + V_{p}$$
(III. 12)

 Pour le 2^{ème} semi-conducteur : On a:

$$V_{2}(x) = -\frac{q \cdot N_{d2}}{2\varepsilon_{2}} (x - x_{n})^{2} + V_{n}$$
(III. 13)

La continuité du potentiel électrique en x=0 conduit à : V_1 = V_2

$$\frac{q \cdot N_{a1}}{2\varepsilon_1} x_p^2 + V_p = -\frac{q \cdot N_{d2}}{2\varepsilon_2} x_n^2 + V_n$$
(III. 14)

On aura donc:

$$V_{d} = V_{n} - V_{p} = \frac{q \cdot N_{d2}}{2\varepsilon_{2}} x_{n}^{2} + \frac{q \cdot N_{a1}}{2\varepsilon_{1}} x_{p}^{2}$$
(III. 15)

D'où les expressions de la largeur de la zone de charge d'espace dans chacun des semi-conducteurs [40] :

$$x_{n} = \left(\frac{2N_{a1} \cdot \varepsilon_{1} \cdot \varepsilon_{2}}{q \cdot N_{d2} (\varepsilon_{1} \cdot N_{a1} + \varepsilon_{2} \cdot N_{d2})}\right)^{1/2} (V_{n} - V_{p})^{1/2}$$
(III. 16)

$$x_{p} = \left(\frac{2N_{d2} \cdot \varepsilon_{1} \cdot \varepsilon_{2}}{q \cdot N_{a1}(\varepsilon_{1} \cdot N_{a1} + \varepsilon_{2} \cdot N_{d2})}\right)^{1/2} \left(V_{n} - V_{p}\right)^{1/2}$$
(III. 17)

III.4.4 Expression de la densité du courant

L'expression du courant dans une hétérojonction s'écrit [40]:

$$J = J_{s} \left[\exp\left(\frac{q \cdot v(1-\alpha)}{k \cdot T}\right) - \exp\left(\frac{-\alpha \cdot q \cdot v}{k \cdot T}\right) \right]$$
(III. 18)

Avec:

$$\alpha = \frac{\varepsilon_2 \cdot N_{d2}}{\varepsilon_1 \cdot N_{a1} + \varepsilon_2 \cdot N_{d2}}$$
(III. 19)

Pour Na₁>> Nd₂:

$$\alpha \approx \frac{\varepsilon_2 \cdot N_{d2}}{\varepsilon_1 \cdot N_{a1}}$$
(III. 20)

III.5 Simulation numérique d'une cellule solaire par SCAPS

III.5.1 Description du logiciel SCAPS

La simulation est un outil puissant utilisé pour analyser et comprendre les phénomènes physiques présents dans les dispositifs à semi-conducteurs.

En vue de la modélisation et de la simulation de cellules solaires, de nombreux logiciels ont été élaboré au cours du temps. SCAPS (Solar Cell Capacitance Simulation One Dimension) est le simulateur qui fera l'objet de notre étude ; il s'agit d'un programme unidimensionnel de simulation établi par le département de l'électronique et système d'information de l'université de Gent, Belgique [61].

Il a été construit pour la simulation des cellules solaires à hétérojonction afin d'examiner la sensibilité des paramètres photovoltaïques (le courant de court-circuit, la tension de circuit ouvert, le rendement, le facteur de forme et le rendement quantique). Il calcule les bandes d'énergie, les caractéristiques I-V ainsi que la réponse spectrale.

III.5.2 Fonctionnement du logiciel

Le logiciel est divisé en de nombreux panneaux, dont chacun permet à l'utilisateur de définir les paramètres et de calculer les résultats.

La fenêtre principale de SCAPS (Figure III.6) est l'interface du panneau de lancement du logiciel appelée "Action Panel". Tous les paramètres de simulation externes peuvent être manipulés à travers ce panneau.

Chapitre III: Etude et simulation d'une cellule solaire à hétérojonction

SCAPS 3.3.09 Action Panel	@ milest in			B	and the second second	2 Marson (*	
Working point	Series res	istance	-Shunt resistance	»•	— Action lis	st ——	All SCAPS settings
Voltage (V) 0.0000			no		Load Action	List	Load all settings
Frequency (Hz) 1.000E+6	1.00E+0	Rs Ohm.cm [^]	2 Rsh = 1.00E+	3	Save Action	List	Save all settings
Analytical model for spectrum	Spectrum from file	y illumination spe	ectrum, then calculate (G(x)	Analytical mo	x) del for G(x)	G(x) from file
Spectrum file name: illumina	ated from left 📃 📗 illumina	ated from right	Incident (or b light power (W	pias) /m2)			
Select	AM1_5	G 1 sun.spe	sun or lamp 0.00		G(x) model	Constant ger	neration G
Spectrum cut off?	Shortwavel. (nm)	0.0	after cut-off 0.00		Ideal Light Cur	rent in G(x) (m	A/cm2) 20.0000
	Long wavel. (nm) 400	0.0			Transmission o	f attenuation fi	Iter (%)
Neutral Density 0.0000	I ransmission (%)	3.000	atter ND 0.00		ldeal Light Cu	rent in cell (m	A/cm2) 0.0000
Action Paus	se at each step				number - of points		
I-V	V1 (V) 🗢 0.0000	V2 (V)	0.8000		\$ 41	0.0200	increment (V)
C-V	V1 (V) 🚔 -0.8000	V2 (V)	0.8000		\$ 81	\$ 0.0200	increment (V)
C-f	f1 (Hz) 🖨 1.000E+2	f2 (Hz)	1.000E+6		\$ 21	\$ 5	points per decade
C QE (IPCE)	WL1 (nm) 🖨 300.00	WL2 (nm)	900.00		\$ 61	\$ 10.00	increment (nm)
Set problem	loaded definition file:			Probl	em file: new proble	m Set Prot	blem
Calculate: single shot	Continue	Stop]	Results o	of calcula	tions	Sa Sa	ave all simulations
Calculate: batch	Batch set-up		B G,R AC	I-V C	-V) (C-f) (QI		ear all simulations
Calculate: recorder	Record set-up		Recor	rder resul	ts		SCAPS info
Calculate: curve fitting	Curve fit set-up		Curvef	itting resu	ults		
Execute script	Script set-up		Script graphs	S	ript variables		Quit

Figure III. 6 : Interface principale de SCAPS

Le panneau d'action est constitué de segments qui sont énumérés ci-dessous :

III.5.2.1 Segment (1): Définition du problème

Set problem

La structure, les matériaux et tous les attributs de la cellule solaire à simuler sont définis dans ce segment.

La section comprend des boutons permettant de construire une nouvelle structure (new), charger une structure existante (load) ou sauvegarder une structure dans la bibliothèque SCAPS (save) ainsi que des boutons pour quitter ou entrer dans l'interface de définition du

périphérique et revenir à l'interface de démarrage ; "cancel" et "ok". Ce panneau est représenté sur la figure III.7.

Chapitre III: Etude et simulation d'une cellule solaire à hétérojonction

SCAPS 3.3.09 Solar Cell Definition Panel			-		
Layers		illuminated from : right left	apply voltage V to : left contact right contact	current reference as a: consumer generator	Invert the structure
add layer	Interfaces				***
right contact (front)					*
Problem file	settings				
new problem set up on: 9-6-2022 at 2:34:32 Bemarks (edit bere)					
Comments (to be) included in the deff Can be edited by the user	ile			new loa	id save OK

Figure III. 7 : Panneau de définition de la cellule

III.5.2.2 Segment(2) : Définition du point de fonctionnement

Les principaux paramètres de simulation sont précisés par le point de fonctionnement tels que : la température, la tension, la fréquence, l'éclairement et les résistances série ou shunt. Ces paramètres sont considérés comme constants et ne changeront pas pendant la simulation.



Figure III. 8 : Panneau de définition des paramètres.

III.5.2.3 Segment(3) : Indication des caractéristiques à simuler :

Dans cette fenêtre, il est possible de choisir une ou plusieurs mesures à simuler: I-V, C-V, C-f et QE(IPCE). Les valeurs de début et de fin de l'argument, ainsi que le nombre d'étapes, peuvent tous être modifiés.

Action	-Pause at each step	number
⊢ ŀV	V1 (V) 🖨 0.0000 V2 (V) 🖨 0.8000	\$41 0.0200 increment (V)
□ C-V	V1 (V) 🖨 -0.8000 V2 (V) 🖨 0.8000	
C-f	f1 (Hz) 🖨 1.000E+2 f2 (Hz) 🖨 1.000E+6	
C QE (IPCE)	WL1 (nm) 🖨 300.00 WL2 (nm) 🗬 900.00	€1 €10.00 increment (nm)

Figure III. 9 : Panneau de sélection des caractéristiques à simuler.

III.5.2.4 Segment(4) : Lancement de la simulation

Le calcul peut être fait de deux façons : mode simple (variation d'un paramètre unique) ou en mode Batch (variation de nombreux paramètres) où l'étude peut être effectuée sur un ou plusieurs paramètres. Les paramètres, l'intervalle et le mode de variation peuvent tous être personnalisés par l'utilisateur (linéaire ou logarithmique).

Calculate: single shot
Calculate: batch
Calculate: recorder
Calculate: curve fitting
Execute script

Figure III. 10 : Panneau de lancement de la simulation.

III.5.2.5 Segment (5): Affichage des courbes

SCAPS affiche les résultats sous forme graphique après la simulation de la structure spécifiée. A ce stade, les courbes peuvent être imprimés (print), enregistrés (save graphs) ou affichés sous formes de données (show).



Figure III. 11 : Panneau d'affichage des courbes.

III.5.3 Présentation de la structure de la cellule PV étudiée :

Notre travail consiste à simuler une cellule solaire à hétérojonction à base de silicium nanocristallin et à optimiser ses paramètres électriques et géométriques afin de créer une cellule avec un rendement électrique optimal.

Elle est constituée principalement d'une couche nanocristalline de type P déposée sur un substrat monocristallin de type N.

Dans notre étude, les caractéristiques I(V) sont simulées dans les conditions d'éclairement solaire AM1.5G.spe

Pour créer notre structure qui existe déjà dans la bibliothèque du simulateur, on clique sur le bouton 'SET PROBLEM' sur le panneau d'action et on choisit 'load' pour sélectionner le fichier 'simple pn.def'. Ensuite, on introduit les paramètres de la couche nanocristalline calculés précédemment par les expressions (III.1-4) et (III.7) sur les cases appropriées comme illustré dans les figures (III.12) et (III.13), et de la même manière on introduit ceux du silicium monocristallin qui sont déjà fixés par la littérature. Cependant, la densité d'états effectifs dans la BC et la BV, vitesse thermique des électrons et des trous, ainsi que les masses effectives sont fixes pour les deux matériaux utilisés.

Chapitre III: Etude et simulation d'une cellule solaire à hétérojonction

thickness (µm) 500.000 Intelayer is pure A y = 0, uniform 0.000 Semiconductor Property P of the pure material pure A (y=0) Dandgap (eV) 1120 electron affinity (eV) 4.050 dielectric permitivity (eletaive) 11.900 CB effective density of states (1/cm*3) 2.800E+19 V Befective density of states (1/cm*3) 1.000E+7 electron nobling (cm?Vs) 1.220C+3 hole mobility (cm*Vs) 5.000E+1 electron mobility (cm*Vs) 5.000E+1 electron mobility (cm*Ns) 1.000E+7 hole mobility (cm*Ns) 5.000E+1 atallow uniform donor density ND (1/cm3) 1.000E+15 no ND grading (uniform) ahalow uniform doneits ND (1/cm3) shallow uniform doneits (ND (1/cm3)) 1.000E+15 is a dispose numberial (y=0) sincw Set absorption model sincw sint(the file in from model sincw s	LAYER 2			n-layer	Recombination model	
Image: Spure A: y = 0, uniform 0.000 Semiconductor Property P of the pure material pure A (y = 0) Semiconductor Property P of the pure material pure A (y = 0) Auger electron capture coefficient (cm ² /s) 0.000E-0 Auger electron attributes 0.000 Semiconductor Property P of the pure material pure A (y = 0) Bandgap (eV) 1.120 electron attributes 1.120 electron fermitively (relative) 1.190 CB affective density of states (1/cm ² 3) 2.800E-19 VB effective density of states (1/cm ² 3) 1.000E-7 hole thermal velocity (cm/s) 1.000E-7 hole mobility (cm ² /Vs) 1.280E-3 icle cross on Subject-10 3.400E-11 Allow Tunneling effective mass of electrons effective mass of electrons 6.000E-1 in N D grading (uniform) shallow uniform door density ND (1/cm.3) shallow uniform model shallow uniform model septe shallow uniform model septe shallow uniform model septe shallow uniform model septe shallow uniform busindee Represent soptipion submodels p	thickness (μm)		500.000	1	Band to band recombinat	tion
The layer is pure A: y = 0, uniform 0.000 Semiconductor Property P of the pure material pure A (y = 0) bandgap (eV) 1.120 electon affinity (eV) 4.050 dielectic perflixity (relative) 11.900 CB effective density of states (1/cm ⁻³) 2.800E+19 VE effective density of states (1/cm ⁻³) 1.000E+7 hole memail velocity (cm/s) 1.000E+7 hole mobility (cm?Vs) 1.280E+3 Nobe mobility (cm?Vs) 5.000E+1 no ND grading (uniform) effective mass of electons shallow uniform door density ND (1/cm3) 1.000E+15 no NA grading (uniform) shallow uniform model shallow uniform interpolation model storyz List of absorption interpolation model storyz List of absorption submodel is present: storyz			uniform pure A (v		Radiative recombination coefficient (cm	°/s) 0.000E+0
Semiconductor Property P of the pure material pure A (y= 0) Semiconductor Property P of the pure material pure A (y= 0) bandgap (eV) 1.120 electron affinity (eV) 4.050 dielectric permittivity (relative) 11.900 CS effectve density of states (1/cm*3) 1.040E+19 electron mobility (cm/S) 1.000E+7 hole thermal velocity (cm/s) 1.000E+7 hole mobility (cm?Vs) 5.000E+1 Allow Tunneling effective mass of lelectrons effective domsity ND (1/cm3) 1.000E+15 no ND grading (uniform) effective mass of holes shallow uniform acceptor density ND (1/cm3) 1.000E+1 Absorption interpolation model save List of absorption submodels present save	The laver is pure A: v =	= 0. uniform	0.000		Auger electron capture coefficient (cm ² 6	6/s) 0.000E+0
Schnichtodebr Propeny For the pole material pole Kry Poly bandgap (eV) 1.120 elector affinity (eV) 4.050 dielectric permitivity (relative) 1.1900 CB effective density of states (1/cm ⁻³) 1.040E+19 elector nebility (cm ² /Vs) 1.000E+7 hole thermal velocity (cm/s) 1.000E+7 hole mobility (cm ² /Vs) 5.000E+1 effective density of states (1/cm ⁻³) 1.000E+7 hole mobility (cm ² /Vs) 5.000E+1 effective mass of holes 6.000E-1 no ND grading (uniform) stallow unifom door density ND (1/cm3) shallow unifom acceptor density NA (1/cm3) 1.000E+1 shallow unifom acceptor density NA (1/cm3) 1.000E+1 Absorption interpolation model statesorption model statesorption submodels present sprey List of absorption submodels present sprey L	Somison ductor Propo	the Right pure material	$p_{\rm HV} = 0$	1	Auger hole capture coefficient (cm^6/s)	0.000E+0
bandgap (eV) 1120 electron affinity (eV) 4050 dielectron termitivity (elaitve) 11900 CB effective density of states (1/cm ⁻³) 2800E-19 VB effective density of states (1/cm ⁻³) 1040E-19 electron mobility (cm ³ /Vs) 1000E-7 hole thermal velocity (cm/s) 1000E-7 electron mobility (cm ³ /Vs) 5000E-1 mo ND grading (uniform) effective mass of electrons 3400E-1 effective mass of electrons 3400E-1 effective mass of electrons 3400E-1 for ND grading (uniform) shallow uniform donor density ND (1/cm.3) 1000E+15 no NA grading (uniform) shallow uniform acceptor density NA (1/cm.3) 1000E+1 Absorption interpolation model set absorption submodels present sqt(hv-Eg) law (SCAPS traditional) (no metastable configuration possible) Accept cancel Load Material	Semiconductor Proper	any P or the pure material	pure A (y = 0)		Recombination at defects: Su	ummary
electron affinity (eV) 4050 dielectric permittivity (elative) 11300 CB effective density of states (1/cm ⁻³) 2800E-19 VB effective density of states (1/cm ⁻³) 100E-7 hole thermal velocity (cm/s) 1000E-7 hole thermal velocity (cm/s) 1280E-3 hole mobility (cm ² /Vs) 5000E+1 effective mass of electrons 3400E-1 effective mass of electrons 3400E-1 effective mass of electrons 3400E-1 in o ND grading (uniform) shallow uniform donor density ND (1/cm3) 1000E+15 no NA grading (uniform) shallow uniform acceptor density NA (1/cm3) 1000E+15 No Ma grading (uniform) shallow uniform acceptor density NA (1/cm3) 1000E+1 Absorption interpolation model serve List of absorption submodels present sqrt(hv-Eg) law (SCAPS traditional) (no metastable configuration possible) Accept cancel Load Material	bandgap (eV)		1.120	1		,
dielectric permitivity (telative) 11.900 CB effective density of states (1/cm 3) 2.800E-19 VB effective density of states (1/cm 3) 1.040E-19 electron thermal velocity (cm/s) 1.000E-7 electron mobility (cm ² /Vs) 5.000E-1 effective mass of electrons 3.400E-1 effective mass of holes 6.000E-1 in o ND grading (uniform) shallow uniform donor density ND (1/cm3) 1.000E+15 no NA grading (uniform) shallow uniform acceptor density NA (1/cm3) 1.000E+1 Absorption interpolation model alpha pure A material (ye0) from file from model statesorption submodels present sqrt(hv-Eg) law (SCAPS traditional) (no metastable configuration possible) Accept cancel Load Material	electron affinity (eV)		4.050	-		
CB effective density of states (1/cm 3) 2 800E+19 VB effective density of states (1/cm 3) 1040E+19 electron thermal velocity (cm(s) 1000E+7 electron mobility (cm ² /Vs) 1280E+3 hole mobility (cm ² /Vs) 5000E+1 effective mass of holes 6 6000E+1 in ND grading (uniform) shallow uniform donor density ND (1/cm 3) 1000E+15 no NA grading (uniform) shallow uniform acceptor density NA (1/cm 3) 1000E+15 No Agrading (uniform) shallow uniform acceptor density NA (1/cm 3) 1000E+1 Absorption interpolation model electron model serve List of absorption submodels present sqrt(hv-Eg) law (SCAPS traditional) (no metastable configuration possible) Accept cancel Load Material	dielectric permittivity (r	relative)	11.900	-		
VB effective density of states (1/cm ⁻ 3) 1040E+19 electron thermal velocity (cm(s) 1000E+7 hole thermal velocity (cm(s) 1000E+7 hole mobility (cm ² /Vs) 5000E+1 electron mobility (cm ² /Vs) 5000E+1 effective mass of electrons 3400E-1 effective mass of holes 6 6000E-1 no ND grading (uniform) shallow unform door density ND (1/cm3) 1000E+15 no NA grading (uniform) shallow uniform acceptor density NA (1/cm3) 1000E+15 no NA grading (uniform) shallow uniform acceptor density NA (1/cm3) 1000E+1 Absorption interpolation model elpha pure A material (y=0) from file into model serve List of absorption submodels present sqrt(hv-Eg) law (SCAPS traditional) (no metastable configuration possible) Accept cancel Load Material	CB effective density of	f states (1/cm^3)	2.800E+19	-		
electron thermal velocity (cm/s) 1000E+7 hole thermal velocity (cm/s) 1200E+7 electron mobility (cm?Vs) 1220E+3 hole mobility (cm?Vs) 5000E+1 in ND grading (uniform) shallow uniform donor density ND (1/cm3) 1000E+15 no ND grading (uniform) shallow uniform acceptor density NA (1/cm3) 1000E+15 Absorption interpolation model alpha pure A material (y=0) statbsorption submodels present sqt(hv-Eg) law (SCAPS traditional) (no metastable configuration possible) Accept cancel Load Material	VB effective density of	f states (1/cm^3)	1.040E+19			
hole thermal velocity (cm/s) 1000E-7 electron mobility (cm?Vs) 1220E-3 hole mobility (cm?Vs) 5000E-1 effective mass of electrons 3400E-1 effective mass of holes 6000E-1 no ND grading (uniform) shallow uniform donor density ND (1/cm3) 1000E+15 no NA grading (uniform) shallow uniform acceptor density NA (1/cm3) 1000E+15 hole mobility (cm?Vs) 1000E+15 hole mobility (cm?Vs) 1000E+15 shallow uniform acceptor density NA (1/cm3) 1000E+15 hole mobility (cm?Vs) 1000E+15 hole mobility (cm?Vs) 1000E+15 hole mobility (cm?Vs) 1000E+15 hole model serve List of absorption submodels present sqrt(hv-Eg) law (SCAPS traditional) (no metastable configuration possible) Accept cancel Load Material	electron thermal veloci	city (cm/s)	1.000E+7	-		
electron mobility (cm?Vs) 1280E-3 hole mobility (cm?Vs) 5000E-1 S000E-1 Allow Tunneling effective mass of electrons 3400E-1 effective mass of holes 6000E-1 no ND grading (uniform) shallow uniform donor density ND (1/cm3) 1000E+15 no NA grading (uniform) shallow uniform acceptor density NA (1/cm3) 1000E+1 Absorption interpolation model alpha pure A material (y=0) from file from model save List of absorption submodels present sqrt(hv-Eg) law (SCAPS traditional) (no metastable configuration possible) Accept cancel Load Material	hole thermal velocity (cm/s)	1.000E+7			
hole mobility (cm?Vs) 500E-1 Allow Tunneling effective mass of electrons 3400E-1 effective mass of holes 6 600E-1 no ND grading (uniform) shallow uniform donor density ND (1/cm3) 100E+15 no NA grading (uniform) shallow uniform acceptor density NA (1/cm3) 1 000E+1 Absorption interpolation model alpha pure A material (y=0) from file from model serve List of absorption submodels present sqrt(hv-Eg) law (SCAPS traditional) (no metastable configuration possible) Accept cancel Load Material	electron mobility (cm²/	Vs)	1.280E+3			
Allow Tunneling effective mass of electrons 3.400E-1 effective mass of holes 6 6000E-1 no ND grading (uniform) shallow uniform doord density ND (1/cm3) 1.000E+15 no NA grading (uniform) shallow uniform acceptor density NA (1/cm3) 1.000E+1 Absorption interpolation model alpha pure A material (y=0) show from file into model save List of absorption submodels present sqt(hv-Eg) law (SCAPS traditional) (no metastable configuration possible) Accept cancel Load Material	hole mobility (cm²/Vs)		5.000E+1			
Protocy Tutticality effective mass of holes 6.000E-1 ino ND grading (uniform) shallow uniform donor density ND (1/cm3) 1.000E+15 no NA grading (uniform) shallow uniform acceptor density NA (1/cm3) 1.000E+15 Absorption interpolation model alpha pure A material (y=0) showy Set absorption model save List of absorption submodels present sqrt(hv-Eg) law (SCAPS traditional) (no metastable configuration possible) Accept Accept cancel		effective mass of electrons	3.400E-1	_		
no ND grading (uniform) shallow uniform donor density ND (1/cm3) 1000E+15 no NA grading (uniform) shallow uniform acceptor density NA (1/cm3) 1000E+1 Absorption interpolation model alpha pure A material (y=0) form file from model save List of absorption submodels present sqrt(hv-Eg) law (SCAPS traditional) (no metastable configuration possible) Accept cancel Load Material		effective mass of holes	6.000E-1			
shallow uniform donor density ND (1/cm3) 100E+15 no NA grading (uniform) shallow uniform acceptor density NA (1/cm3) 100E+1 Absorption interpolation model alpha pure A material (y=0) from file from model Set absorption submodels present sqrt(hv-Eg) law (SCAPS traditional) (no metastable configuration possible) Accept cancel Load Material	no ND grading (uniform	m)		-		
no NA grading (uniform) shallow uniform acceptor density NA (1/cm3) 1 000E+1 Absorption interpolation model alpha pure A material (y=0) from file from model set absorption submodels set(hv-Eg) law (SCAPS traditional) (no metastable configuration possible) Accept cancel	shallow uniform donor	r density ND (1/cm3)	1.000E+15			
shallow uniform acceptor density NA (1/cm3) 1.000E+1 Absorption interpolation model alpha pure A material (y=0) from file from model Set absorption model save List of absorption submodels present sqt(hv-Eg) law (SCAPS traditional) (no metastable configuration possible) Accept cancel	no NA grading (uniform	m)		-		
Absorption interpolation model alpha pure A material (y=0) from file from model Set absorption model save List of absorption submodels present sqt(hv-Eg) law (SCAPS traditional) (no metastable configuration possible) Accept cancel	shallow uniform accep	otor density NA (1/cm3)	1.000E+1			
alpha pure A material (y=0) from file show Set absorption model save List of absorption submodels present sqrt(hv-Eg) law (SCAPS traditional) add a Defect 1 (no metastable configuration possible) Accept cancel	Absorption interpola	ation model				
Add a Set absorption model Save List of absorption submodels present: sqr(hv-Eg) law (SCAPS traditional) Add a Defect 1 (no metastable configuration possible) Accept cancel	alpha p	uro A material (v=0)	1			
Set absorption model save List of absorption submodels present sqrt(hv-Eg) law (SCAPS traditional) Defect 1 (no metastable configuration possible) Accept Cancel Load Material	from fi	file from model	show		Add a	
List of absorption submodels present sqrt(hv-Eg) law (SCAPS traditional) (no metastable configuration possible) Accept cancel Load Material	Set ab	osorption model	save		Defect 1	
sqrt(hv-Eg) law (SCAPS traditional) (no metastable configuration possible) Accept cancel Load Material	List of absorption su	ibmodels present	1			
(no metastable configuration possible) Accept cancel Load Material	sqrt(hv-Eg) law (SC	CAPS traditional)				
Accept cancel Load Material					(no metastable configuration possible)	
Accept cancel Load Material						
					Accept cancel	Load Material

Figure III. 12 : Panneau de définition des propriétés du substrat.

LAYER 1		p-layer		Recombination model
thickness (nm)	ickness (nm) 👻 50.00			Band to band recombination
		uniform pure A (y	=0) -	Radiative recombination coefficient (cm*/s) 0.000E+0
The layer is pure A: y	= 0, uniform	0.000		Auger electron capture coefficient (cm^6/s) 0.000E+0
Semiconductor Prope	rty P of the pure material	pure A (y = 0)	1	Auger hole capture coefficient (cm^6/s) 0.000E+0
Commondation rope	ny r or the pare material	pure rr (y = u)		Recombination at defects: Summary
bandgap (eV)		2.051		
electron affinity (eV)		3.628		
dielectric permittivity (r	elative)	9.437		
CB effective density of	states (1/cm^3)	2.800E+19		
VB effective density of	states (1/cm^3)	1.040E+19	-	
electron thermal veloc	ity (cm/s)	1.000E+7	-	
hole thermal velocity (cm/s)	1.000E+7		
electron mobility (cm²/	Vs)	5.000E+1		
hole mobility (cm²/Vs)		2.718E+0		
	effective mass of electrons	3.400E-1		
Allow Furthening	effective mass of holes	6.000E-1		
no ND grading (uniform	n)		-	
shallow uniform donor	density ND (1/cm3)	1.000E+1		
no NA grading (uniform	n)	_	-	
shallow uniform accep	tor density NA (1/cm3)	1.000E+17		
Absorption interpola	tion model			
alpha pu from f	ure A material (y=0)	how		Add a
Set ab	sorption model	save		Defect 1
List of absorption su sqrt(hv-Eg) law (SC	bmodels present CAPS traditional)			(no metastable configuration possible)
				Accept cancel Load Material Save Material

Figure III. 13 : Panneau de définition des propriétés de la couche nanocristalline.
La structure à étudier est schématisée sur la figure III.14 à l'aide du simulateur SCAPS :



Figure III. 14 : Structure de la cellule PV étudiée.

Les défauts peuvent être supprimés en cliquant sur le bouton 'remove' dans le panneau de définition des propriétés de la couche.

Après avoir saisi toutes les données essentielles (configuration de la cellule solaire, propriétés de la couche et propriétés du matériau), la simulation peut être démarrée en cliquant sur le bouton 'calculer' dans l'interface du panneau d'action.

III.5.4 Simulation de la cellule solaire étudiée pour les différentes tailles des nanocristallites

III.5.4.1 Taille des nanocristallites: 4nm

III.5.4.1.1 Paramètres de la structure étudiée

Les propriétés physiques de la couche nanocristalline et du substrat pour les différents dopages sont présentées dans le tableau (III.1):

Taille des nanocristallites (4nm)	par	paramètres de la couche active (p)					
épaisseur		50n	ım		500µm		
Dopage (cm ⁻³) Paramètres	10 ¹⁷	10 ¹⁶					
bande interdite (eV)	2.0513	2.0513	2.0513	2.0513	1.12		
affinité électronique (eV)	3.6284	3.6284	3.6284	3.6284	4.05		
permittivité diélectrique (relative)	9.4367	9.4367 9.4367 9.4367 9.4367					
Densité d'états effectifs dans la BC (cm ⁻³)	2.8 *10 ¹⁹	2.8 *10 ¹⁹	2.8 *10 ¹⁹	2.8 *10 ¹⁹	2.8 *10 ¹⁹		
Densité d'états effectifs dans la BV (cm ⁻³)	1.04 * 10 ¹⁹	1.04 * 10 ¹⁹					
vitesse thermique des électrons (cm/s)	10^{7}	10 ⁷	10 ⁷	10 ⁷	10 ⁷		

vitesse thermique des trous (cm/s)	10 ⁷				
mobilité des électrons (cm²/Vs)	50	50	50	50	1106.8
mobilité des trous (cm²/Vs)	2.718	2.6739	2.6336	2.6050	50
masse effective des électrons	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34
masse effective des trous	0.6	0.6	0.6	0.6	0.6
ND (cm ⁻³)	10	10	10	10	10 ¹⁶
NA (cm ⁻³)	10 ¹⁷	10 ¹⁸	10 ¹⁹	10 ²⁰	10

Tableau III. 1 : paramètres de simulation pour une taille des nanocristallites 4nm.

III.5.4.1.2 Résultats de simulation

Le tableau III.2 représente les résultats de simulation obtenus par le logiciel SCAPS :

Taille des nanocristallites	Dopage de la couche active (cm ⁻³)	Rendement (%)	FF (%)	Vco (v)	Jcc (mA/cm)
	10 ¹⁷	2.35	29.68	4.99	1.53
	10 ¹⁸	7.79	31.15	27.57	0.87

4nm	10 ¹⁹	31.12	82.76	42.75	0.84
	10^{20}	31.45	82.81	42.75	0.86

Tableau III. 2 : Résultats de simulation pour une taille des nanocristallites de 4nm.

La figure ci-dessous illustre les caractéristiques I-V :





III.5.4.2 Taille des nanocristallites: 6nm

III.5.4.2.1 Paramètres de la cellule étudiée

Le tableau III.3 regroupe les paramètres physiques de la couche nanocristalline et ceux du substrat pour les différents dopages :

Taille des nanocristallites (6nm)	para	nmètres de la o	couche active	(p)	paramètres du substrat (n)
épaisseur		50n	m		500µm
dopage (cm ⁻³) paramètres	10 ¹⁷	10 ¹⁸	10 ¹⁹	10 ²⁰	10 ¹⁶
bande interdite (eV)	1.7249	1.7249	1.7249	1.7249	1.12
affinité électronique (eV)	3.7726	3.7726	3.7726	3.7726	4.05
permittivité diélectrique (relative)	10.1749	10.1749	10.1749	10.1749	11.9
Densité d'états effectifs dans la BC (cm ⁻³)	2.8 *10 ¹⁹				
Densité d'états effectifs dans la BV (cm ⁻³)	1.04 * 10 ¹⁹				
vitesse thermique des électrons (cm/s)	10 ⁷				
vitesse thermique des trous (cm/s)	10 ⁷				
mobilité des électrons (cm²/Vs)	50	50	50	50	1106.8

mobilité des trous (cm²/Vs)	4.2342	4.1281	4.0094	3.9661	50
masse effective des électrons	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34
masse effective des trous	0.6	0.6	0.6	0.6	0.6
ND (cm ⁻³)	10	10	10	10	10 ¹⁶
NA (cm ⁻³)	10 ¹⁷	10 ¹⁸	10 ¹⁹	10 ²⁰	10

Tableau III. 3 : Paramètres de simulation pour une taille des nanocristallites 6nm.

III.5.4.2.2Résultats de simulation

Le tableau III.4 représente les résultats de simulation obtenus par le logiciel SCAPS :

Taille des nanocristallites	Dopage de la couche active (cm ⁻³)	Rendement (%)	FF (%)	Vco (v)	Jcc (mA/cm)
	10 ¹⁷	31.15	82.71	42.69	0.85
6nm	10 ¹⁸	31.41	82.82	42.69	0.86
	10 ¹⁹	31.42	82.81	42.69	0.86
	10 ²⁰	31.42	82.81	42.69	0.86

Tableau III. 4 : Résultats de simulation pour une taille des nanocristallites de 6nm.

La figure ci-dessous illustre les caractéristiques I-V :



Figure III. 16 : Caractéristiques I-V pour une taille des nanocristallites 6nm.

III.5.4.3 Taille des nanocristallites: 8nm

III.5.4.3.1 Paramètres de la cellule étudiée

Les paramètres physiques de la couche nanocristalline et ceux du substrat pour une gamme de dopages allant de 10^{17} jusqu'à 10^{20} cm⁻³ sont récapitulés dans le tableau cidessous :

Taille des nanocristallites (8nm)	para	paramètres de la couche active (p)					
épaisseur		50nm					
dopage (cm ⁻³) parameters	10 ¹⁷	10^{17} 10^{18} 10^{19} 10^{20}					
bande interdite (eV)	1.5677	1.5677	1.5677	1.5677	1.12		

affinité électronique (eV)	3.8473	3.8473	3.8473	3.8473	4.05
permittivité diélectrique (relative)	10.5410	10.5410	10.5410	10.5410	11.9
Densité d'états effectifs dans la BC (cm ⁻³)	2.8 *10 ¹⁹				
Densité d'états effectifs dans la BV (cm ⁻³)	1.04 * 10 ¹⁹				
vitesse thermique des électrons (cm/s)	10 ⁷				
vitesse thermique des trous (cm/s)	10 ⁷				
mobilité des électrons (cm²/Vs)	50	50	50	50	1106.8
mobilité des trous (cm²/Vs)	5.8720	5.6700	5.4484	5.3687	50
masse effective des électrons	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34
masse effective des trous	0.6	0.6	0.6	0.6	0.6
ND (cm ⁻³)	10	10	10	10	10 ¹⁶
NA (cm ⁻³)	10 ¹⁷	10 ¹⁸	10 ¹⁹	10 ²⁰	10

Tableau III. 5 : Paramètres de simulation pour une taille des nanocristallites 8nm.

III.5.4.3.2Résultats de simulation

Les résultats de simulation générés par le logiciel SCAPS sont présentés dans le tableau III.6 :

Taille des nanocristallites	Dopage de la couche active (cm ⁻³)	Rendement (%)	FF (%)	Vco (v)	Jcc (mA/cm)
	10 ¹⁷	31.38	82.82	42.65	0.86
8nm	10 ¹⁸	31.39	82.82	42.65	0.86
onn	10 ¹⁹	31.39	82.82	42.65	0.86
	10 ²⁰	31.39	82.82	42.65	0.86

Tableau III. 6 : Résultats de simulation pour une taille des nanocristallites de 8nm.

La figure ci-dessous illustre les caractéristiques I-V :



Figure III. 17 : Caractéristiques I-V pour une taille des nanocristallites 8nm.

III.5.4.4 Etude comparative des résultats de simulation

La figure III.18 illustre la superposition de la variation du rendement en fonction du dopage pour les trois tailles de nanocristallites :



Figure III. 18 : Variation du rendement en fonction du dopage pour trois tailles de nanocristallites.

La figure (III.19) représente la superposition de la variation du facteur de forme en fonction du dopage pour les trois tailles de nanocristallites :



Figure III. 19 : Variation du facteur de forme en fonction du dopage pour trois tailles de nanocristallites.

La superposition de la variation de rendement et de facteur de forme en fonction de dopage de la couche active pour les trois tailles des nanocristallites est représentée sur les figures III.18 et III.19. Nous observons une variation assez notable de rendement et de facteur de forme avec l'augmentation du dopage de la couche nanocristalline pour une taille des nanocristallites 4nm, par contre pour la taille de 6nm, ils restent relativement invariables et le meme comportement est observé pour une taille de 8nm.

Après la comparaison des résultats obtenus, ce qui est intéressant de constater c'est que le meilleur rendement a été obtenu pour une taille de 4nm.

Pour cette raison nous avons choisi ce cas comme valeur optimale pour varier quelques paramètres dans le but d'évaluer leurs influences sur le rendement de notre cellule.

III.5.5 Etude des paramètres influant sur les performances de la cellule solaire

III.5.5.1 Variation de l'épaisseur du substrat :

III.5.5.1.1 Résultats de simulation

Le tableau 7 représente les résultats de simulation pour différentes valeurs d'épaisseur du substrat :

Taille des nanocristallites	Dopage de la couche active (cm ⁻³)	Dopage du substrat (cm ⁻³)	Epaisseur du substrat (µm)	Rendement (%)	FF (%)	Vco (v)	Jcc (mA/cm ²)
			100	35.14	9.29	42.48	8.57
			300	35.29	9.13	42.66	8.72

4nm	10^{20}	10^{18}					
			500	35.36	8.99	42.75	8.86
			200	20100	0.77	.2.70	0.00
			700	35.41	8.86	42.80	8.99

Tableau III.7 : Résultats de simulation pour la variation d'épaisseur du substrat.



Figure III. 20 : Rendement de la cellule en fonction d'épaisseur du substrat.



Figure III. 21 : Facteur de forme de la cellule en fonction d'épaisseur du substrat.

III.5.5.1.2 Discussion des résultats

D'après les résultats de tableau III.7, les figures III.20 et III.21 nous remarquons que les valeurs du rendement augmentent considérablement avec l'augmentation des épaisseurs du substrat, le meilleur rendement de 35.41% est obtenu pour une épaisseur de 700µm, ceci s'explique par une meilleure absorption conduisant à une conversion plus importante. Nous observons en outre, une légère augmentation de la densité de courant de court circuit et de la tension en circuit ouvert avec l'accroissement de l'épaisseur du substrat, contrairement au facteur de forme qui a tendance à décroitre.

III.5.5.2 Variation de la résistance série

III.5.5.2.1 Résultats de simulation

Le tableau III.8 représente les résultats de simulation pour une gamme de résistance série allant de 0 jusqu'à 10Ω :

Taille des nanocristallites	Dopage de la couche active (cm ⁻³)	Résistance série (Ω)	Rendement (%)	FF (%)	Vco (v)	Jcc (mA/c m ²)
4nm	10 ²⁰	0	35.36	8.99	42.75	8.86
		2	31.6	8.03	42.75	8.86
		4	27.84	7.08	42.75	8.86
		6	24.08	6.12	42.75	8.86
		8	20.32	5.16	42.75	8.86
		10	16.55	4.21	42.75	8.86

Tableau III. 8 : Résultats de simulation pour la variation de la résistance.



Figure III. 22 : Rendement de la cellule en fonction de la résistance série.



Figure III. 23 : Variation du facteur de forme de la cellule en fonction de la résistance série.

III.5.5.2.2 Discussion des résultats

A partir des résultats récapitulés dans le tableau III.8, nous remarquons que la tension en circuit ouvert et le courant de court circuit ne changent pas considérablement avec les différentes valeurs de résistance. Parallèlement, on constate une diminution remarquable de rendement et de facteur de forme.

III.5.5.3 Variation du dopage du substrat

III.5.5.3.1 Résultats de simulation

Le tableau III.9 représente les résultats de simulation pour une gamme de dopage du substrat allant de 10^{16} cm⁻³ jusqu'à 10^{18} cm⁻³ :

Taille des nanocristallites	Dopage de la couche active (cm ⁻³)	Dopage du substrat (cm ⁻³)	Rendement (%)	FF (%)	Vco (v)	Jcc (mA/c m ²)
4nm	10 ²⁰	10 ¹⁶	31.45	82.82	42.746	0.855
		10 ¹⁷	33.99	48.52	42.746	1.578
		10 ¹⁸	35.36	8.99	42.746	8.855

Tableau III. 9 : Résultats de simulation pour la variation du dopage du substrat.



Figure III. 24 : Rendement de la cellule en fonction de dopage du substrat.



Figure III. 25 : Facteur de forme de la cellule en fonction de dopage du substrat.

III.5.5.3.2 Discussion des résultats :

On note que plus la concentration du dopage du substrat augmente plus les valeurs de rendement augmentent. En fait, le rendement le plus élevé est obtenue pour une concentration de 10¹⁸ cm⁻³. Cependant, on observe que le facteur de forme diminue d'une manière drastique avec l'augmentation de la concentration du dopage. La valeur de la tension en circuit ouvert qui est de l'ordre de 42.74 V reste relativement stable, et la densité du courant de court-circuit est sujet d'une augmentation remarquable.

III.6 Conclusion

Au vu des différents résultats de l'étude menée à travers ce chapitre nous constatons que les effets quantiques, le dopage, l'épaisseur de substrat ainsi que la résistance série contrôlent les performances de la cellule solaire. Les résultats de simulation montrent qu'en augmentant la concentration du dopage, l'épaisseur du substrat et en diminuant la taille des nanocristallites, la résistance série, le rendement s'améliore.

La cellule solaire possède un meilleur rendement de 35.41% pour une taille des nanocristallites de 4nm, un dopage de la couche nanocristalline de 10^{20} cm⁻³.



Conclusion générale

Ce travail de mémoire a concerné l'étude d'une cellule solaire à hétérojonction basée sur les nanocristaux de silicium afin de montrer l'impact de cette technologie sur l'efficacité d'une cellule solaire de troisième génération. SCAPS est le logiciel de simulation qui a été proposé pour la modélisation et la simulation de notre cellule pour sa capacité de simuler les cellules à hétérojonction.

La recherche bibliographique nous a permis de mettre l'accent sur la diversité des domaines d'application des nanostructures. En effet, de nouvelles phénomènes et lois physiques apparaissent à l'échelle nanométrique de la matière.

Notre étude a été menée en fonction de plusieurs paramètres tels que, l'épaisseur de substrat, les concentrations de dopage, et la tailles des nanocristallites.

L'ensemble des résultats a montré que la réduction de la taille des nanocristallites et l'augmentation de dopage de la couche nanocristalline conduisent à l'amélioration du rendement de la cellule solaire.

En effet, le rendement optimal obtenu dans notre étude est de 35.41% correspondant à une taille des nanocristallites de 4nm, à une épaisseurde substrat de 700 μ m, à un dopage de la couche nanocristalline de 10²⁰ cm⁻³ et de 10¹⁸ cm⁻³ pour le substrat.

En perspective, nous suggérons d'améliorer les performances de ce genre de cellule solaire en considérant un empilement de plusieurs couches nanocristallines.



[1] **C.Busseret,** «Etudes optiques et électriques des propriétés électroniques de nanocristaux de silicium pour composants mono-électroniques.», thèse de doctorat, école doctorale électronique, électrotechnique, automatique de Lyon, France, 2001.

[2] R.W.Kelsall, LW. Hamley, M. Geoghegan, «Nanoscale Science and Technology.»Wiley, England, 2005.

[3] **S.Charvet,** «Croissance et propriétés d'émission dans le visible de nanograins de silicium dans une matrice de silice : analyse par ellipsométrie spectroscopique.», thèse de doctorat, université de Caen/Basse Normandie, France, 1999.

[4] **T.Nychyporuk**, «Nouvelles morphologies du silicium nanostructuré issues de l'anodisation électrochimiques : Elaboration, propriétés physico-chimiques et applications.», thèse de doctorat, institut national des sciences appliquées de Lyon, France, 2006.

[5] **M.Roussel**, «Etude de modélisation de la précipitation de particules de silicium dans des couches de silice nanométriques.», thèse de doctorat, université de Rouen, France, 2013.

[6] **F.Delachat**, «Elaboration et caractérisation de nanoparticules de silicium dans du nitrure de silicium en vue d'applications photovoltaïques.» Thèse de doctorat, université de Strasbourg, France, 2010.

[7] J.Barbé, «Fabrication et caractérisation de nanocristaux de silicium encapsulés dans des Matrices siliciées amorphes : rôle des interfaces et de la matrice sur les propriétés Structurales, optiques et électriques.» Thèse de doctorat, L'université de Toulouse III Paul Sabatier, France, 2013.

[8] A.G.Cullis, L.T.Canham, P. D. J. Calcott, «The structural and luminescence Properties of porous silicon. » J. Appl. Phys. Vol. 82, p. 909 -965, 1997.

[9] **C.Bonafos, B.Colombeau, A. Altibelli**, «Kinetic study of group IV nanoparticles ion beam synthesized in SiO2. » Nucl. Instr. And Meth. B. vol. 178, p.17-24, 2001

[10] T.Baron, F.Martin, P. Mur, C. Wyonb, M. Dupuyb, «Silicon quantum dot nucleation on Si3N4, SiO2 and SiOxNy substrates for nanoelectronic devices. » J. Cryst. Growth. vol. 209, p. 1004–1008, 2000.

83

[11] **H.Seifarth, J. U.Schmidt, R.Grötzschel, M.Klimenkov**, «Phenomenological model of reactive r.f.-magnetron sputtering of Si in Ar/O2 atmosphere for the prediction of SiOx thin film stoichiometry from process parameters. » Thin Solid Films, Vol. 389, p. 108–115, 2001.

[12] **L.Levoska, M.Tyunina, S.Leppävuori,** «Laser ablation deposition of silicon nanostructures. », Nanostruct. Mater, vol. 12, p.101-106, 1999.

[13] **R.E. Hummel, and M.H. Ludwig**, «Spark-processing – A novel technique to prepare light-emitting, nanocristalline silicon. »J. Lumin. Vol. 68, p.69-76, 1996.

[14] **F. Huisken, B. Kohn, and V. Paillard**, «Structured films of light-emitting silicon nanoparticles produced by cluster beam deposition. »Appl. Phys. Lett. Vol. 74, p.3776-3778, 1999.

[15] **M. Ostraat, and J. De Blauwe**, «Future silicon nanocrystal nonvolatile memory technology. »Materials Research Society Proceedings, Vol. 686, 2002.

[16] **L. Tsybeskov, K.D. Hirschman, and S.P. Duttagupta**, «Fabrication of Nanoc-ristalline Silicon Superlattices by controlled Thermal Recrystallization. »Phys. Stat. Sol. (a), Vol. 165, p.69-77, 1998.

[17] **E. Tranvouez**, «Lithographie par AFM. », «Thèse LPM. Lyon : INSA de Lyon, p. 145, 2005.

[18] **M. Lopez, B. Garrido, and C. Bonafos**, «Phenomenological model of efficient visible emission from Si ion beam synthesised NC in SiO2. » E-MRS Spring Meeting, Strasbourg France, 2000.

[19] **H.Haoues**, «Contribution à l'étude des nanostructures semi-conductrices a base de silicium.», thèse de doctorat, université de Jijel, 2014.

[20] **B. Garrido, M. López, C. García, A. Pérez-Rodríguez, J. R. Morante,** «Influence of average size and interace passivation on the spectral emission of Si nanocrystal embedded in SiO2.» J. Appl. Phys, vol. 91, p. 798-807, 2002.

[21] **N. HAFSI,** « étude et modélisation du comportement des nanocristaux semi-conducteurs comme source de lumière.», thèse de doctorat, l'Université de Jijel, 2016.

[22] **S.Amara** « Etude Caractérisation optique et structurale des couches minces d'oxydes complexes pour applications photoniques.» Thèse de Doctorat, Université Ferhat Abbas Sétif 1, 2015.

[23] **H.Bouridah**« Etude des propriétés de couches minces de silicium dope azote obtenues par lpcvd et implantées au bore pour grille poly-silicium de transistors MOS.» Thèse de Doctorat, Université Mentouri Constantine, 2005.

[24] B.E. Warren, «X-Ray diffraction. ». Addison-Wesley publishing Company.

[25] **H. Haoues, H. Bouridah, M. R. beghoul, F. mansour, R. remmouche and P. Temple-Boyer** « Formation of silicon nanocrystals by thermal annealing of low-pressure chemical-vapor deposited amorphous SiNx (x=0.16) thin films.» Mater. Sci. Semicond. Process. 16, 6 2013.

[26]**E. Oliviero**, « Microscopie Électronique et Analytique (MEA) » Université de Montpellier.

[27] **J.R. Ferraro, and K. Krishnnan**, «Practical Fourier Transform Infrared Spectroscopy. » Acod. Press. San Diego,1990.

[28] **J. De La Tores Ramos** « Etude des propriétés optoélectroniques de structures et de composants à base de nanostructures de Si.»Thèse de Doctorat, INSA de Lyon, 2003.

[29] **P. F. Trwoga, A. J. Kenyon and C. W. Pitt** « Modeling the contribution of quantum confinement to luminescence from silicon nanoclusters. » J. Appl. Phys. 83, 3789, 1998.

[30]**W.Ke, X.Feng and Y. Huang** « The effect of Si nanocrystal size distribution on Raman spectrum.» J. Appl. Phys. 109, 083526, 2011.

[31]**H.Richter, Z.P.Wang and L. Ley**« The one phonon Raman spectrum in microcrystalline silicon.» Solid State Commune. 39, 625 ,1981.

[32] D. C. Armeanu, «Modélisation physique du stockage dans les nanocristaux de mémoiresFlash quantiques. », Thèse de doctorat, Université de Strasbourg France, 2011.

[33] **N. Bouguetaia**, « Contribution à l'Etude et à la Simulation d'un Concentrateur Cylindrons-Parabolique», thèse de magister, université de Constantine, 2013.

[34]**M. Navarro**, «Cellules Photovoltaïques Organiques Transparentes Dans Le Visible», thèse de doctorat, l'Université Toulouse, 2008.

[35] **A. Aarras** « Caractérisation des cellules photovoltaïques à base d'hétérojonction de silicium a-Si/c-Si », mémoire de master, université Abou-bekr belkaid –Tlemcen, 2018.

[36] **A. Mahfoud,** « modélisation des cellules solaires tandem à couches minces et à haut rendement», thèse de doctorat,Université Sétif-1, 2015.

[37]**M. Petibon Stéphane**, «nouvelles architectures distribuées de gestion et de conversion de l'énergie pour les applications photovoltaïques » Thèse de doctorat, Université Toulouse III-Paul Sabatier, France, 2009.

[38] **O. BONNAUD**, « Composants à semi-conducteurs, de la physique du solide aux transistors », ellipses, paris, 2010.

[39] **G. Ben Abderrazak**, «Etude par simulation numérique de la Cellule solaire à base de CZTS par SCAPS», thèse de doctorat, Université Med Khider, Biskra, 2014.

[40] H. Mathieu, «Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques», Dunod, Paris, 2009.

[41] **V. Foncrose**, «nano cristaux, films et cellules photovoltaïques de $CU_2ZnSn(SSe)_4$ par impression d'encres », Thèse de doctorat, Université Toulouse, 2015.

[42] **Stephen J.Sze and M.K Lee**, «Solar cell Device Physics», second Edition, Elsevier, ISBN 978-0-12-374774-7, 2010.

[43] **Y. E. Gmili**, «Étude et caractérisations par cathodoluminescence de couches minces d'InGaN pour le photovoltaïque, » Université de Lorraine, 2013.

[44] **A. BELKAID**, «Conception et implémentation d'une commande MPPT de haute performance pour une chaine de conversion photovoltaïque autonome», UNIVERSITE FERHAT ABBAS - SETIF 1 UFAS(ALGERIE), 2015.

[45] **H. Kintz**, « Réalisation de couches minces nano composites par un procédé original couplant la pyrolyse laser et la pulvérisation magnétron : application aux cellules solaires tout silicium de troisième génération », thèse de doctorat, université paris sud, 2013.

[46] **S. Bensalem**, « Effets de la température sur les paramètres caractéristiques des cellules solaires », Thèse magister, université FERHAT ABBAS – SETIF, 2011.

[47] **H. Messaoudene**, « Détermination intelligente de la puissance maximale des modules photovoltaïques», thèse de Magister, université al hadj lakhdar Batna, 2014.

[48] **S. Benghabrit**, « Elaboration et caractérisation de couches minces CdS par bain chimique CBD pour application photovoltaïque », thèse de doctorat, université de Mohamed Boudiaf, Oran, 2015.

[49] **S. Zerarka, B. Serdji**, « Mémoire Master "Study of electron transport effect on perovskite solar cells using simulation», Université Mohamed khider à Biskra, 2020.

[50] **K. amara,** « Contribution à l'étude d'une conception d'une centrale photovoltaïque de puissance (1MW) interconnectée au réseau de distribution électrique moyenne tension», thèse de magister, université de Tizi-Ouzzou, 2015.

[51] **M. Ben Ali, S. Rahmouni,**« Simulation et Optimisation d'une Cellule Solaire à base de Cu (In, Ga) Se2» Thèse de Doctorat, Université de Ahmed draia Adrar ,2018.

[52] **M.GOUFI, B.HAMDOUNI,** «Etude et Simulation D'une Cellule Photovoltaïque à Pérovskite », Mémoire de Master, Université Larbi Ben M'Hidi O.E.B, 2021.

[53] **M. BELARBI**, « Modélisation des paramètres électriques d'une cellule solaire sensibilisée par colorant », mémoire de master, université de Tlemcen, 2013.

[54] **Martin, A. Green and Cells**, «Solar, Operating Principles, Technology, and System Applications», Prentice-Hall Inc Englewood Cliffs, 1982.

[55] **M.Mimoune**, « Etude des capteurs photovoltaïques basés sur les nanotechnologies », thèse de doctorat,Université du Québec à Trois-Rivières, Canada,2016.

[56] **L.W.Wang, A.Zunger**, « Dielectric Constants of Silicon Quantum Dots», Physical review letters, Vol.73, 1039-1042, 1994.

[57] **L-F.Mao**, «The quantum size effects on the surface potential of nanocrystalline silicon thin film transistors», thin solid films vol 318, 3396-3401, 2010.

[58]**D.V.Melnikov et J. R.chelikowsky**, «electron affinities and ionization energies in Si and Ge nanocrystals», department of chemical engineering and materials science, Minnesota supercomputing institute, university of Minnesota, Minneapolis, Minnesota 55455, USA, PHYSICAL REVIEW B 69, 113305, 2004.

[59] **D.M.Caughey and R.Thomas**, « Carrier mobilities in silicon empirically related to doping and field», Proceedings of the IEEE, vol.55, N°12, pp.2192-2193, 1967.

[60] **N.Gupta and B.Tyagi**, « Effect of grain size on the mobility and transfer characteristics of polysilicon thin film transistors», 2004.

[61] **M. Burgelman, P. Nollet, S. Degrave**, «Modelling polycrystalline semiconductor solar cells», Thin Solid Films, 361, 527-532, 2000.

Résumé

Ce présent travail consiste à l'étude des performances photovoltaïque d'une cellule solaire à hétérojonction constituée d'un substrat de silicium type N et d'une couche nanocristalline type P en utilisant l'outil de simulation unidimensionnel SCAPS.

Dans ce contexte, nous avons déterminé l'influence de certains paramètres (épaisseur, concentration de dopage du substrat, et la taille des nanocristallites sur les performances de ces cellules à savoir tension en circuit ouvert, courant de court circuit, le rendement et le facteur de forme. Une étude préalable a été menée pour la détermination de l'influence des effets quantiques afin d'introduire ces paramètres dans le logiciel de simulation.

Mots clés : cellule solaire, photovoltaïque, hétérojonction, silicium, couche nanocristalline, simulation, SCAPS.

Abstract

This work consists the study of the photovoltaic performance of a heterojunction solar cell consisting of a type N silicon substrate and a type P nanocrystalline layer using the SCAPS one-dimensional simulation tool.

In this context, we determined the influence of certain parameters (thickness, concentration of doping of the substrate, and the size of the nanocrystals) on the performance of these cells: open circuit voltage, short circuit current, efficiency and fill factor. A preliminary study was conducted to determine the influence of quantum effects in order to introduce these parameters into the simulation software.

Keywords: solar cell, photovoltaic, heterojunction, silicon, nanocrystalline layer, simulation, SCAPS.

الملخص

هذا العمل يهدف إلى دراسة الأداء الكهروضوئي لخلية شمسية غير متجانسة متكونة من ركيزة سيليكون من النوع السالب (N) و طبقة من البلورات النانومترية من النوع الموجب (P) باستخدام أداة محاكاة أحادية الأبعاد SCAPS.

على هذا النحو، تم تحديد تأثير بعض المعايير (السمك، تركيز المنشطات في الركيزة و حجم البلورات النانومترية) على أداء هذه الخلايا: تيار الدارة القصيرة،جهد الدارة المفتوحة،معامل الشكل، والمردود الكهربائي.

أجريت دراسة أولية لتحديد التأثيرات الكمومية من أجل إدخال هذه المعلومات في برنامج المحاكاة.

الكلمات المفتاحية: الكهروضوئي، خلية شمسية، سيليكون، بلورات نانومترية، محاكاة.