

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



Université El-Hadj Lakhdar - BATNA 1

Faculté des Sciences de la Matière

Département de Physique



THÈSE

En vue de l'obtention du
Diplôme de Doctorat

Présenté par :

BENAZIEZ NADJDIA

Thème :

Etude Des Propriétés Electrique Et Photovoltaïques
Des Contacts Métal/Semi-conducteur

Spécialité : Physique des matériaux métalliques et semi-conducteurs

Soutenue le 25 /04/ 2017

Devant le jury :

Président :	El-Djemai Belbacha	Pr	Université de Batna1
Rapporteur :	Abdelhamid Ounissi	Pr	Université de Batna2
Examineurs :	Mohamed Chahdi	Pr	Université de Batna1
	Aissa Belgacem-Bouzida	Pr	Université de Batna1
	Ramdane Mahamdi	Pr	Université de Batna2
	Abdellah Attaf	Pr	Université de Biskra

REMERCIEMENTS

La préparation d'une thèse est à la fois une démarche personnelle et un travail d'équipe. Au terme de cette étude, je tiens à exprimer ma reconnaissance et adresser mes très sincères remerciements à toutes les personnes qui ont contribué d'une manière ou d'une autre, au bon déroulement et à l'aboutissement de ce travail.

Je tiens à remercier tout d'abord mon directeur de thèse, Monsieur Abdelhamid Ounissi professeur à l'université de Batna2, pour avoir bien voulu diriger ce travail et pour m'avoir constamment orientée et conseillée tout au long de ce dernier. Qu'il trouve ici mes très sincères remerciements et mon profond respect.

Je tiens également à présenter ma profonde gratitude et mes très sincères remerciements à Monsieur EL-Djemai Belbacha, professeur à l'université de Batna1 qui me fait l'honneur de s'intéresser à mon travail et de présider le jury, pour m'avoir encouragé à débiter la recherche et pour avoir suivi ces travaux de recherches depuis le Diplôme de Magistère jusqu'à la soutenance de cette thèse.

J'adresse à Monsieur Mohamed Chahdi, professeur à l'université de Batna1, l'expression de ma profonde reconnaissance pour avoir voulu examiner mon travail et faire partie du jury, ainsi que pour sa contribution à ma formation, pour l'intérêt qu'il a porté à ce travail ainsi que pour leurs remarques et commentaires qui ont contribué à l'amélioration de ce travail.

Je tiens également à remercier Monsieur Aissa Belgacem-Bouzida professeur à l'université de Batna1 qui a accepté d'examiner mon travail et de faire partie du jury.

Je tiens également à remercier Monsieur Abdellah Attaf professeur à l'université de Biskra qui a accepté d'examiner mon travail et de faire partie du jury.

J'adresse à Monsieur Ramdane Mohamedi, professeur à l'université de Batna2, l'expression de ma profonde reconnaissance pour avoir voulu examiner mon travail et faire partie du jury.

Mes remerciements s'adressent aussi à toutes les personnes qui, de près ou de loin m'ont aidée à l'accomplissement de ce travail, en particulier à Monsieur Djamel Haddad, pour sa contribution à l'aboutissement de ce travail.

Je joindrai à ces remerciements tous mes enseignants de département de physique et d'électronique à l'université de Batna1 et Batna2.

TABLE DES MATIÈRES

Introduction générale	8
Chapitre I : Phénoménologie et modèles des barrières Schottky	11
Introduction	11
I.1 Généralités (contacts métal / semi-conducteur)	11
I.1.1 Contacts redresseurs	11
I.1.2 Contacts ohmiques.....	13
I.2. Théories de formation de barrière Schottky	14
I.2.1. Théorie de Schottky.....	14
I.2.2. Théorie de Bardeen.....	15
I.2.3. Théorie de Cowley et Sze :.....	16
I.2.4. Modèle d'interface linéaire.....	17
I.2.5. Modèle de MIGS (Induced Gap States Model).....	18
I.2.6 Le SBH et les liaisons chimiques d'interface	19
I.2.7. Modèle unifié de défaut (UDM).....	20
I.3 Mécanismes de conduction dans les diodes Schottky	20
I.3.1. Introduction.....	20
I.3.2. Théories de transport	21
I.3.2.1. Émission au dessus de la barrière.....	21
I.3.2.2. Mécanismes de conduction par effet tunnel	24
I.3.2.3. Recombinaison dans la zone de charge d'espace	26
Chapitre II : Propriétés électriques des structures métal/semiconducteur	29
Introduction	29
II.1. Structure modélisée	29
II.2. Analyse des résultats	30
II.2.1. Profil de dopage et mobilités des porteurs.....	30
II.2.2. Densités de porteurs et Diagramme des bandes.....	32
II.2.3. Potentiel et champ électrique	34
II.2.4. Courant électrique	37
II.2.5. Effet de changement de travail de sortie	40

II.2.6. Effet de changement de concentration de dopage et épaisseur de la couche épitaxiale.....	42
II.2.7. Effet de changement de température.....	45
II.2.8. Structures avec protection périphérique.....	46
II.2.8.1. Protection par plaque de champ sur un diélectrique.....	46
II.2.8.2. Structure avec anneau de garde.....	54
Conclusion	56
Chapitre III: Cellules photovoltaïques	58
Introduction	58
III.1. Approches de Piégeage de la Lumière dans les Cellules photovoltaïques.....	59
III.1.1. couche antireflet	59
III.1.2. Texturation de la surface	60
III.1.3. Couches minces et effet de plasmon de surface.....	61
III.2. Plasmons de Surface	62
III.2.1 Propriétés optiques de nanoparticules métalliques isolées:	64
III.2.1.1 La théorie de Mie	64
III.2.1.2. Approximation quasi-statique	66
III.2.2 Théorie de milieu effective (Théorie de Maxwell Garnett).....	68
Chapitre IV: Propriétés Photovoltaïques Des Contacts Métal/Semiconducteur	73
Introduction	73
IV.1 Caractéristiques électrique d'une cellule photovoltaïque Schottky ...	73
IV.1.1 Effet de température et d'éclairement.....	74
IV.1.2 Réduction des pertes dues à la réflexion	77
IV.1.2.1 Revêtements anti-réfléchissants	77
IV.2 amélioration plasmonique	80
IV.2.1 Structure modélisée	80
IV.2.2 La constant diélectrique effective d'un métamatériau optique structurée avec des nanocylindres en Argent.....	80
IV.2.3 Calcul de la réflectivité	86
IV.2.4 Analyse et interprétation des résultats.....	88
IV.2.4.1 Réponse spectral, Courant et les facteurs de qualité	91
IV.2.4.2 Effet de taille des nanoparticules	92
IV.2.4.3 Effet de distance inter-particulaire	94

IV.2.4.5 Effet de la couche d'espacement entre la couche des nanoparticules et la couche de $a - Si: H$	96
Conclusion générale	100
Annexe A	103
Annexe B	105
Annexe C	114
Bibliographie	123
Abstract	129

Introduction générale

En dehors de ces applications classiques en détection HF, redressement à fort courant ou commutation dans les circuits analogiques, le contact métal-semiconducteur (MS) ou diode Schottky constitue un moyen puissant d'investigation pour l'étude des propriétés des semiconducteurs.

D'ailleurs, les premiers dispositifs électroniques à semiconducteurs étaient des diodes basées sur le contact entre un métal et un semiconducteur appelées diodes à pointes [1]. Leurs emplois fondés sur un fait découvert expérimentalement par Bardeen en 1874: le redressement de faibles signaux alternatifs au contact d'une aiguille métallique avec des cristaux de certains minéraux à semiconducteurs naturels. De tels appareils primitifs étaient peu sûrs et leurs caractéristiques étaient instables et variables d'un élément à l'autre. Néanmoins, ils ont servi comme outil de base à l'étude du phénomène de redressement qu'on connaît actuellement dans ces dispositifs.

La meilleure compréhension de ce phénomène de redressement n'a débuté qu'en 1931, lorsque Schottky et, indépendamment Mott, ont montré que lors de la mise en contact d'un métal avec un semiconducteur, il se produit à la région d'interface des deux matériaux une hauteur de barrière de potentiel. Par la suite, Tamm, Schokley [2] et Bardeen ont étudié l'influence des états de surface sur le mécanisme de formation de la hauteur de la barrière de potentiel. Cette étude a contribué beaucoup à la compréhension des mécanismes de conduction dans ces contacts.

Les contacts métal-semiconducteurs consistent donc en l'existence d'une barrière de potentiel, des mécanismes de transport de charges et des états de surface. Ils peuvent se comporter soient comme des contacts redresseurs soient comme des contacts ohmiques. Les contacts MS redresseurs sont utilisés, en pratique, dans le domaine de la radiofréquence et dans les circuits analogiques; leurs particularités résident en l'absence presque totale des porteurs minoritaires et leurs faibles capacités: en revanche, les contacts métal-semiconducteur ohmiques sont très utiles pour les interconnexions dans les circuits intégrés.

Notre travail s'inscrit sur l'étude et la caractérisation électrique des structures Schottky en vue de leurs propriétés électriques et leurs utilisations dans les générateurs photovoltaïques. Actuellement, la production de l'énergie domestique et dans l'industrie est basée, en grande partie, sur une ressource limitée qui devient de plus en plus rares, pendant que les demandes énergétiques du monde s'élèvent continuellement. Etant donné que cette forme d'énergie couvre une grosse partie de la production énergétique actuelle, il s'avère nécessaire de trouver une autre solution pour prendre le relais. La contrainte imposée est d'utiliser une source d'énergie économique et peu polluante. la recherche des ressources d'énergie alternatives est devenue une question cruciale de nos jours. Beaucoup de recherches scientifiques ont été menées dans le domaine de la production d'énergie

nucléaire et la production d'électricité par le vent et la transformation d'énergie solaire. Dans ce dernier cas la conception, l'optimisation et la réalisation des systèmes photovoltaïques sont des problèmes d'actualité. La résolution de ces problèmes conduit sûrement à une meilleure exploitation de l'énergie solaire. Ces systèmes photovoltaïques générateurs d'électricité peuvent être exploités dans différents lieux: électrification des sites isolés, installation dans les bâtiments ou raccordement direct au réseau d'électricité,...

Actuellement le matériau principal de la conversion photovoltaïque est le silicium sous ses différentes formes. L'inconvénient majeur de cette énergie est le faible rendement des matériaux de conversion et le coût élevé. Les cellules solaires en couches minces sont considérées comme des alternatives principales et peu coûteuses aux cellules conventionnelles à base de plaquettes. Avec l'épaisseur de quelques microns et ci-dessous, elles peuvent de manière significative diminuer la quantité du matériel semiconducteur exigé, et ainsi, réduire les coûts de production de telles cellules [3]. Cependant, en raison de l'absorption relativement faible de la lumière par ces matériaux, des mécanismes plus efficaces de piégeage de lumière sont nécessaires pour une meilleure performance par rapport aux cellules solaires à base de plaquette.

Dans ce contexte, le travail présenté dans cette thèse a porté sur la conception, la modélisation et la caractérisation de contacts métal – semiconducteur.

Ce manuscrit se présente de la façon suivante:

- Dans le premier chapitre, nous commencerons par donner les supports théoriques nécessaires à la compréhension du fonctionnement des structures étudiées. Nous donnerons une brève introduction des contacts MS

- et discuterons les modèles de base de la formation du SBH. Nous présenterons ensuite, les modèles théoriques utilisés pour rendre compte des processus de transport qui peuvent régir le transport de charges dans nos structures.

- Dans le second chapitre, nous utilisons la simulation numérique à deux dimensions pour analyser les différentes propriétés des contacts MS, en utilisant le logiciel TCAD-SILVACO qui est un simulateur puissant de dispositifs à semiconducteur et permet d'extrapoler le comportement électrique du composant électronique en se basant sur des modèles spécifiques pour chaque phénomène. nous présenterons les résultats de simulation concernant les propriétés électrique de notre structure et aussi l'effet d'ajout d'une protection périphérique sur ces propriétés.

- Dans le troisième chapitre, nous présentons les intérêts des cellules photovoltaïques sur couche mince et l'effet des plasmons de surface sur l'amélioration de l'absorption de ces cellules. Enfin, nous donnons un vue historique sur le champ du plasmons de surface et leurs applications.

- Dans le quatrième chapitre, nous analyserons les résultats de simulations d'une cellule photovoltaïque de type Schottky pour différentes températures et éclairagements, et étudierons comment peuvent les couches

antireflets, la texturisation et les nanoparticules améliorer le rendement de ces cellules.

CHAPITRE I : PHENOMENOLOGIE ET MODELES DES BARRIERES SCHOTTKY

INTRODUCTION

La technologie des dispositifs électroniques à semi-conducteurs repose en grande partie sur des jonctions métal-semi-conducteur. Depuis que le comportement redresseur des contacts métal / semi-conducteur (M/S) a été découvert, de plus de cent ans, beaucoup d'effort théorique a été consacré à interpréter les mesures électriques dans ces systèmes, tels que les caractéristiques $I-V$ et $C-V$, et prévoir la valeur des paramètres qui entrent dans les modèles semi-empiriques développés dans ce chapitre. Le plus important de ces paramètres est la hauteur de la barrière Schottky (SBH). Les modèles semi empiriques de transport sont largement répandus, et fournissent généralement une bonne description des données expérimentales. Les mécanismes physiques derrière la formation de la barrière Schottky, cependant, demeurent une question de discussion.

Dans ce chapitre, nous donnons d'abord une brève étude du comportement des contacts métal/semi-conducteur et définissons les grandeurs qui caractérisent les interfaces et conditionnent les transferts de charges entre les matériaux. Puis nous donnons une description de certains des modèles de base qui concernent la formation de la barrière de potentiel et discutons leurs propriétés et implications générales. Dans la dernière partie de ce chapitre, nous étudions brièvement les mécanismes de conduction dans les diodes Schottky.

I.1 GENERALITES (CONTACTS METAL / SEMI-CONDUCTEUR)

I.1.1 CONTACTS REDRESSEURS

La figure 1.1 (a) présente le diagramme énergétique d'un contact redresseur métal/semi-conducteur de type n à l'équilibre thermique, c-à-d, sans polarisation externe appliquée.

La quantité centrale est la hauteur de la barrière Schottky $q\phi_{Bn}$, qui est la différence entre le maximum de la bande de conduction E_c et le niveau de Fermi FL à l'interface. Pour un semi-conducteur de type p , la quantité principale est la différence entre le niveau de Fermi FL et le minimum de la bande de valence E_v , est noté $q\phi_{Bp}$. La hauteur des barrières $q\phi_{Bn}$ et $q\phi_{Bp}$ est une propriété intrinsèque de l'interface M/S, qui ne dépend pas, en principe, de la tension de polarisation appliquée ou de dopage du semi-conducteur. Elle est reliée par la règle de Schottky [4]:

$$q\phi_{Bp} + q\phi_{Bn} = E_g \quad (\text{I.1})$$

Où E_g est largeur de la bande interdite du semi-conducteur.

L'abaissement de la hauteur de la barrière SBH indiqué dans figure.1.1, $q\Delta\phi$, est dû à la force image près de la surface de métal. La courbure des bandes dans le semi-conducteur (figure.1.1), est due à une charge d'espace positive des ions donneurs qui ne sont plus compensés près de l'interface. Dans le volume du semi-conducteur, la charge uniforme des donneurs ionisés est compensée par la densité des électrons dans la bande de conduction. Au lieu de cela, plus près du métal, la densité des électrons dans la bande de conduction diminue exponentiellement avec la différence $E_c - E_{Fs}$.

La région résultante épuisée des électrons près de l'interface, appelé *la zone de déplétion*, à une largeur W donnée par [5]

$$W = \sqrt{\frac{2\epsilon_s}{qN_D} \left(\phi_{Bn} - V_n - V - \frac{kT}{q} \right)} \quad (I.2)$$

Où ϵ_s est la permittivité diélectrique du semi-conducteur, V_n est la différence d'énergie entre le niveau des porteurs majoritaires et la bande de conduction du semi-conducteur, N_D la densité des porteurs, V la tension de polarisation, q la valeur absolue de la charge d'électron, et kT l'énergie thermique.

La courbure des bandes dans la zone de déplétion, représente une barrière de potentiel pour des électrons. Pour un semi-conducteur de type p , la région d'interface est épuisée des trous. Les bandes se courbent dans la direction opposée, et les quantités ϕ_{Bn} , V_n , et N_D sont remplacés par les quantités ϕ_{Bp} , V_p , et N_A dans l'équation (I.2), où V_p est la différence entre FL et la bande de valence du semi-conducteur et N_A la densité des accepteurs. La zone de déplétion (dont la largeur typique est 100 –1000 Å) est responsable du comportement de rectification du contact.

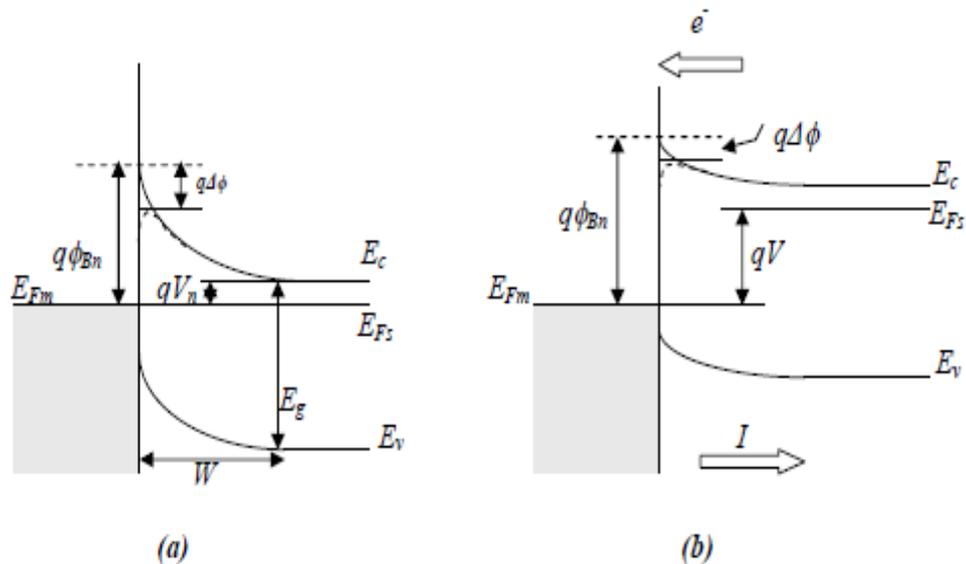


Figure.1.1: Diagramme des bandes d'énergie pour un contact métal / semi-conducteur de type n . À l'équilibre thermodynamique (a), et sous une polarisation directe V (b)

Le diagramme des bandes d'énergie sous une polarisation directe est illustré dans figure. 1.1(b). Comme d'abord suggéré par Schottky [6], la chute de tension se développe entièrement dans la zone de déplétion, et change la forme de la barrière. Dans le volume du semi-conducteur, les électrons acquièrent une énergie additionnelle qV , de sorte que le nombre d'eux ce qui peuvent surmonter la barrière augmente exponentiellement avec V , et ainsi le courant sera en fonction de la tension. Quand qV devient comparable au SBH, la zone de déplétion disparaît (régime de bande plat), et le contact devient approximativement ohmique.

Si une polarisation inverse est appliquée, la largeur de la zone de déplétion augmente et la barrière de potentiel devient plus haute pour les électrons du semi-conducteur, de sorte que de moins en moins d'eux puissent atteindre le métal. Cependant, les électrons de métal qui ont une énergie thermique suffisamment pour surmonter le SBH sont accélérés dans la zone de déplétion et donnent une petite contribution négative au courant.

I.1.2 CONTACTS OHMIQUES

Une situation, dans laquelle le contact est idéalement ohmique, indépendamment des propriétés de dopage du semi-conducteur, est quand le SBH disparaît ou est négative (plus précisément, plus petit que V_n). La figure 1.2 montre le diagramme énergétique d'un contact ohmique métal / semi-conducteur de type n avec un petit négatif SBH.

Comme dans le cas d'un contact redresseur, un réarrangement des électrons de conduction se produit à l'interface. Quelques électrons passent du métal dans le semi-conducteur en raison du SBH négatif, et s'accumulent à l'interface [7].

Puisque la densité N_c d'états effective de la bande de conduction est en général 100 à 1000 fois plus grande que la densité des impuretés, la zone d'accumulation est beaucoup plus mince que la zone de déplétion, comme peut être estimé en remplaçant N_D par N_c dans Eq.(I.2).

Quand la jonction est polarisée, la tension de polarisation est répartie dans tout le semi-conducteur, et les porteurs peuvent couler librement à travers l'interface due à l'absence de la barrière de potentiel. En technologie de dispositif, "les contacts ohmiques" sont les contacts qui ont une résistivité négligeable relativement à la résistivité du volume du semi-conducteur.

En général, les contacts redresseurs ou ohmiques peuvent être obtenus selon la différence des travaux de sortie des matériaux et le type du semi-conducteur comme suit :

Avec $\phi_m > \phi_s$ le contact métal-semi-conducteur (n) est redresseur

le contact métal-semi-conducteur (p) est ohmique

Avec $\phi_m < \phi_s$ le contact métal-semi-conducteur (n) est ohmique

le contact métal-semi-conducteur (p) est redresseur

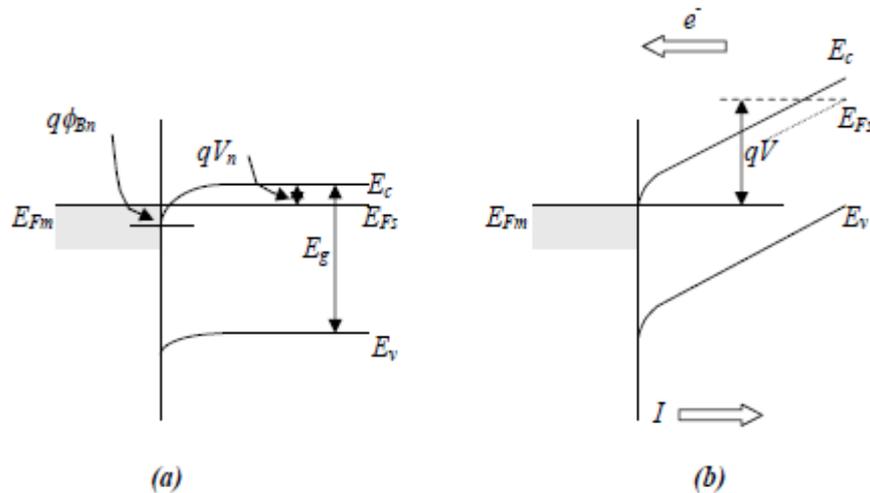


Figure.1.2. Diagramme énergétique d'un contact ohmique métal / semi-conducteur de type n avec une petite négative hauteur de barrière, à l'équilibre thermodynamique (a), et sous polarisation (b).

I.2. THEORIES DE FORMATION DE BARRIERE SCHOTTKY

La hauteur de la barrière Schottky SBH ($q\phi_{Bn}$ ou $q\phi_{Bp}$) joue un rôle central : elle commande le profil entier des bandes d'énergie de la jonction, et ainsi les caractéristiques électriques du contact. Cependant, l'issue des paramètres et les mécanismes physiques qui déterminent la valeur des SBH restent ouverts.

Au cours des années, plusieurs des modèles ont été proposés pour expliquer la formation de la barrière Schottky. Nous n'entreprendrons pas une discussion approfondie de tous les modèles existants, mais décrivons seulement brièvement les modèles les plus importants.

I.2.1. THEORIE DE SCHOTTKY

Quand un semi-conducteur est mis au contact avec un métal, il s'établit une barrière de potentiel électrostatique entre les deux matériaux.

La figure (1.3) représente la structure de bande d'un couple M/S de type N (**a.** matériaux séparés, **b.** matériaux en contact) dans ce dernier cas, le semi-conducteur perd des électrons qui s'accumulent à la surface du métal et une charge d'espace positive provenant des donneurs ionisées apparaît dans le volume du semi-conducteur. La neutralité électrique est obtenue par une charge négative créée par l'accumulation des électrons à la surface du métal. Un équilibre s'établit dès que les niveaux de Fermi des deux matériaux sont alignés. Lorsque, à température constante la redistribution des charges est terminée, la barrière de potentiel est fixée. La barrière de potentiel ($q\phi_B$), vue du côté du métal, est alors égale à la différence entre le travail de sortie du métal et l'affinité électronique χ_B du semi-conducteur [4].

$$\phi_B = \phi_m - \chi_s \quad (I.3)$$

Vue du coté semi-conducteur, elle est égale à la différence entre le travail de sortie du métal et celui du semi-conducteur.

$$V_{bi} = \phi_m - \phi_s \quad (1.4)$$

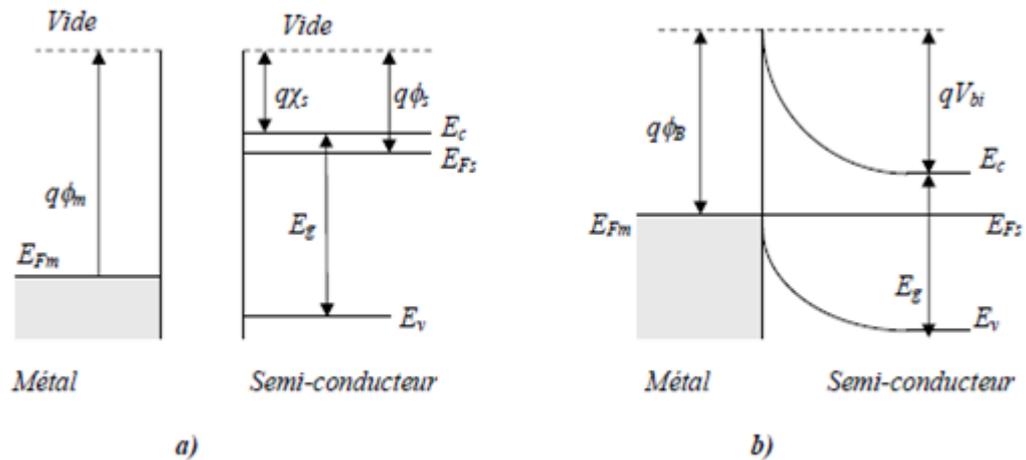


Figure.1.3. Structure de bande d'un couple métal / semiconducteur de type n

a) matériaux séparés

b) matériaux en contact.

I.2.2. THEORIE DE BARDEEN

D'après la théorie de Schottky, la barrière de potentiel dépend de la nature du métal. Cependant, des résultats obtenus sur des jonctions réalisées à l'air ont montré que la barrière était indépendante de la nature du métal. J.Bardeen en 1947 [8], a montré que ceci était dû à la présence des états de surface existant sur le semi-conducteur. Ils proviennent de la rupture du réseau cristallin à la surface du cristal. Ils sont en densité très élevée, environ un état par atome de surface. De même, ces états peuvent provenir des impuretés adsorbées à la surface du semi-conducteur.

L'échange de charges par le semi-conducteur va donc se faire avec ces états et la hauteur de barrière est alors indépendante de la nature de métal déposé.

La figure (1.4) représente le diagramme d'énergie d'une jonction (M/S) de type N en présence des états de surface. D'abord la charge globale en surface du semi-conducteur est nulle, mais l'équilibre thermodynamique n'est pas réalisé ceci dû à la présence des états vides entre $q\phi_0$ et le niveau de Fermi. ϕ_0 étant le niveau de neutralité des états de surface. Au fur et à mesure que les états vides se remplissent entre $q\phi_0$ et E_F , l'équilibre thermodynamique se réalise entraînant la formation d'une charge positive dans le volume du semi-conducteur qui compense la charge négative à la surface. On assiste donc à une courbure des bandes avant la présence du métal. Après contact, une faible fraction des

électrons quitte ces états vers le métal. Mais comme leur densité est importante, il n'en résulte qu'un très faible déplacement du niveau du semi-conducteur en surface et la courbure des bandes n'est pratiquement pas modifiée. Dans le cas où la densité d'états de surface est très grande (10^{12} à 10^{13} états $\text{cm}^{-2} \text{eV}^{-1}$), Bardeen a montré que la hauteur de barrière est indépendante du métal. Elle a pour valeur :

$$\phi_B = \frac{E_g}{q} - \phi_0 \quad (\text{I.5})$$

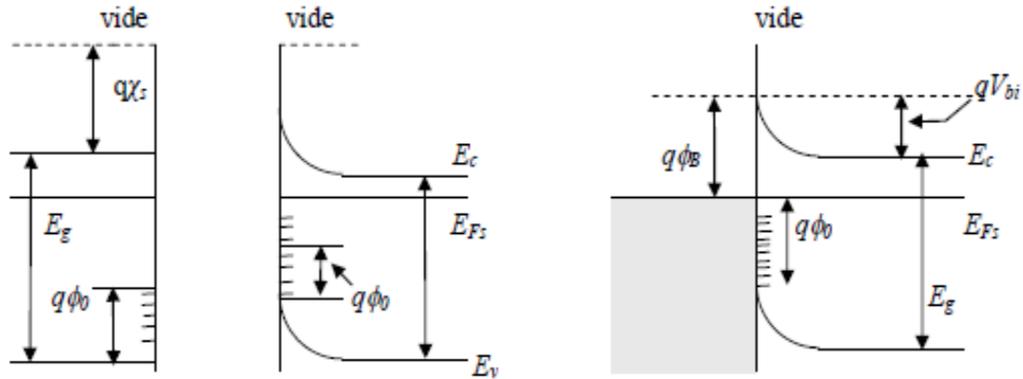


Figure.1.4 : diagramme d'énergie d'une jonction métal / semi-conducteur de type n en présence d'états de surface

I.2.3. THEORIE DE COWLEY ET SZE :

Les deux théories citées précédemment représentent chacune un cas limite. Dans un premier, la hauteur de la barrière ne dépend que du métal et dans un deuxième, elle dépend des états de surface. Cependant le cas intermédiaire qui est d'ailleurs le plus fréquent, est celui où la barrière est gouvernée à la fois par les états de surface et par les travaux de sortie des matériaux.

A.M.Cowley et S.M.Sze [9] , ont proposé une théorie unifiant celle de Schottky et celle de Bardeen. Ils supposent l'existence entre les deux corps d'une couche interfaciale mince d'épaisseur D_i . La figure (1.5) représente le diagramme de bande d'un contact métal-semi-conducteur en présence d'une couche interfaciale. L'expression de la hauteur de barrière est alors [8]:

$$\phi_B = \gamma(\phi_m - \chi_s) + (1 - \gamma) \left(\frac{E_g}{q} - \phi_0 \right) - \Delta\phi$$

(I.6)

Où $\Delta\phi$ représente l'abaissement de la barrière par effet de la force image ou effet Schottky.

$$\Delta\phi = \left(\frac{qE}{4\pi\epsilon_s} \right)^{1/2} \quad \text{et} \quad \gamma = \frac{\epsilon_i}{\epsilon_i + q^2 D_i N_s} \quad (\text{I.7})$$

E étant le champ électrique et N_s la densité des états de surface.

ϵ_s et ϵ_i représentent respectivement la permittivité du semi-conducteur et de la couche interfaciale.

D'après l'expression (I.6), on retrouve les deux cas limites de Schottky et de Bardeen suivant que N_s tend vers zéro ou vers l'infini.

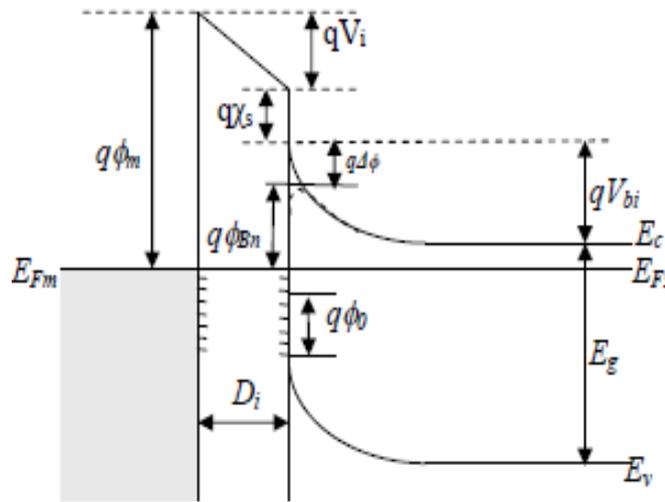


Figure.1.5 : Contact métal/semi-conducteur avec états de surface et couche interfaciale.

I.2.4. MODELE D'INTERFACE LINEAIRE

Kurtin, McGill, et Mead [7] ont proposés un modèle d'interface linéaire où ils ont assumés que la hauteur de la barrière $q\phi_B$ où ϕ_B (potentiel) dépend linéairement du travail de sortie du métal.

$$\phi_B = \gamma\phi_m + C \quad (\text{I.8})$$

Où γ est un paramètre de pente qui reflète la sensibilité de ϕ_B au métal et C est une constante de dimension d'un potentiel.

A partir d'une compilation des données expérimentales pour plusieurs semi-conducteurs, ils se sont corrélés γ avec l'ionocité de liaisons des semi-conducteurs. La figure (1.6) représente la variation de γ avec l'ionocité du semi-conducteur. Cette ionocité est mesurée ici par la différence d'électronégativité des constituants du matériau.

Pour les semi-conducteurs covalents ou pseudo-covalents, tels que Ge, Si, GaAs et InP, γ est très faible (environ 0.1), la barrière de potentiel est alors peu sensible au travail

de sortie du métal car le niveau de Fermi est ancré par les états de surface. Par contre pour les matériaux plus ioniques, dans lesquels la différence d'électronégativité des constituants est supérieure à 1eV, le travail de sortie du métal joue un rôle majeur. C'est le cas de la plupart des composés II-VI, et des composés III-V du haut du tableau de Mendéléev.

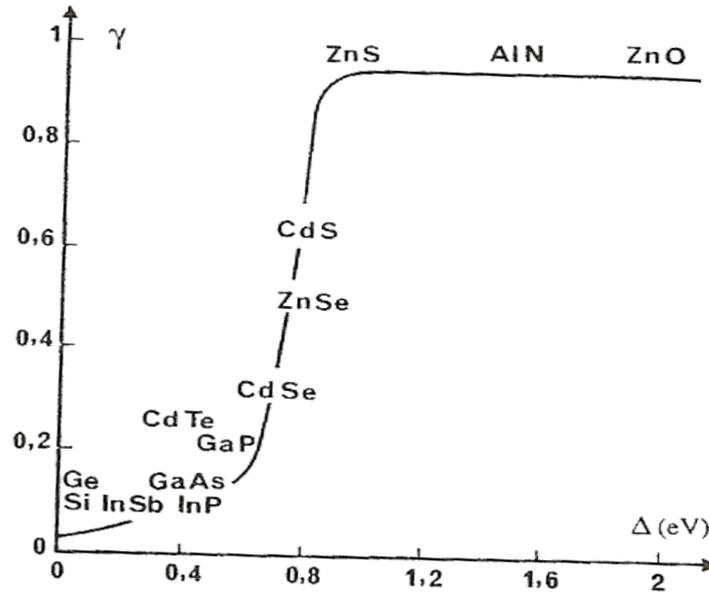


Figure.1.6 : variation du paramètre de pente (γ) avec la différence d'électronégativité (Δ) des constituants du semi-conducteur [7].

I.2.5. MODÈLE DE MIGS (INDUCED GAP STATES MODEL)

Le travail de Heine [6] a été motivé par l'observation que les valeurs du paramètre γ sont fondamentalement les mêmes pour des interfaces avec et sans d'une couche interfaciale. Au lieu des états de surface, Heine souligne le rôle des (MIGS). À n'importe quelle interface de solide/solide, il y a trois genres d'états électroniques : ceux qui propagent des deux côtés de la jonction, ceux qui propagent dans un matériel et affaiblissent dans l'autre matériel, et ceux qui se délabrent en les deux matériaux et sont localisés à l'interface.

Les MIGS appartiennent au deuxième groupe; ils ont des énergies dans le gap fondamental de semi-conducteur, et ils affaiblissent exponentiellement du côté semi-conducteur de la jonction. Les queues de MIGS peuvent stocker une charge dans le semi-conducteur, à une certaine distance de la surface du métal, comme dans le cas des états de surface.

L'expression correspondante pour la pente γ a la même forme que dans le modèle de Cowley et Sze, mais N_s est remplacé par la densité extérieure de MIGS, D_s , et l'épaisseur D_i de couche interfaciale est remplacée par une distance efficace, connexe à la longueur d'affaiblissement δ_s de queues de MIGS.

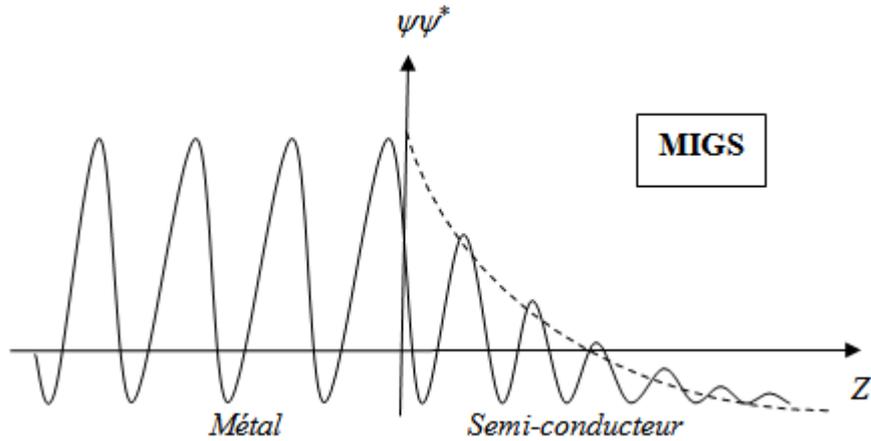


Figure.1.7 : Fonction d'onde aux interfaces métal/semiconducteur [4].

I.2.6 LE SBH ET LES LIAISONS CHIMIQUES D'INTERFACE

Quand un contact intime M/S est formée à l'équilibre thermodynamique, des liaisons chimiques sont établies à l'interface. Toutes les propriétés électroniques de l'interface de ce contact sont naturellement influencées par ces liaisons d'interface.

La pertinence des liaisons de la structure à l'interface de M/S avec la détermination de la hauteur de la barrière Schottky SBH a été proposée par Andrews et Phillips [4] dans leur étude de la chaleur de formation des siliciures $-\Delta H_f$. Ces résultats sont représentés dans la figure.1.8.

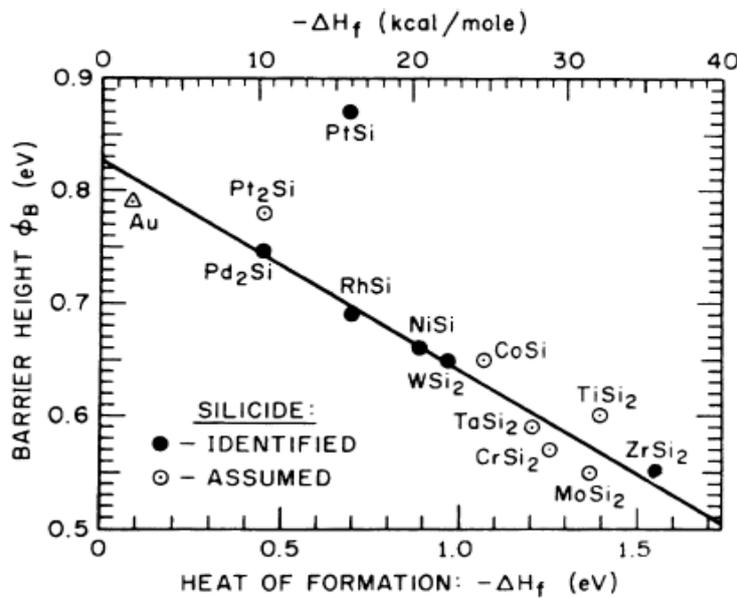


Figure.1.8. : Les hauteurs de la barrière des interfaces de siliciure des métaux de transition-Si sont tracées en fonction de la chaleur de la formation de siliciure

$$\phi_{Bn} = 0.83 + 0.18\Delta H_f. [4].$$

Le SBH du siliciure a été montré pour se corrélérer linéairement avec la chaleur de la formation du siliciure. Ainsi la dépendance linéaire entre la hauteur de la barrière de siliciure avec $-AH_f$ a été rationalisée en raison de la longueur de liaison métal/Si et faiblesse d'interaction. Dans le même esprit, Brillson a proposé d'analyser le paramètre de pente en termes de chaleur de la formation du semi-conducteur, puisque c'est une mesure de la réactivité chimique à l'interface.

I.2.7. MODELE UNIFIE DE DEFAUT (UDM)

Après le travail de Bardeen, il a été bientôt identifié que les états de surface intrinsèques du semi-conducteur ne pourraient pas d'une manière satisfaisante expliquer le goupillage observé du niveau de Fermi aux contacts métal / semi-conducteur covalent.

En particulier, on le sait qu'il n'y a aucun tel état dans la bande interdite sur les surfaces (110) de GaAs [10], mais les contacts métal/GaAs (110) montrent toujours un ancrage de FL. Par conséquent, des états localisés extrinsèques ont été suggérés. Pour des composés III-V, Spicer et Co-Workers, ont proposé que les défauts soient produits près de la surface de semi-conducteur quand le métal de contact est déposé sur cette surface. Ces défauts mènent à goupiller le niveau de Fermi. Ceci s'appelle le modèle unifié de défaut (UDM).

Hughes en 1986 a proposé que le goupillage de FL soit provoqué par des défauts extrinsèques dans le semi-conducteur résultants de l'incorporation des impuretés ou des atomes de métal déposés dans le réseau du semi-conducteur.

I.3 MECANISMES DE CONDUCTION DANS LES DIODES SCHOTTKY

I.3.1. INTRODUCTION

Les caractéristiques courant-tension d'une diode Schottky est généralement décrit par l'émission thermoionique [5]:

$$J = J_0 \cdot (e^{qV/nkT} - 1) \quad (\text{I.9})$$

Où V la tension appliquée, k la constante de Boltzmann, T la température, n le facteur d'idéalité, et J_0 la densité de courant de saturation :

$$(I.10) \quad J_0 = A^* T^2 \cdot \exp\left(-\frac{q\phi_B}{kT}\right)$$

A^* est la constante de Richardson.

Pour une diode Schottky idéale, le facteur d'idéalité, n est égale à l'unité, et la hauteur de la barrière (en eV) est indépendante de la température et de la tension de polarisation.

La densité de courant de saturation J_0 , et le facteur d'idéalité n peuvent être obtenus à partir de l'interception et de la pente des courbes $\ln(J) = f(V)$, respectivement, sous la forme :

$$\ln J = \ln J_0 + qV/nkT \quad (\text{I.11})$$

Si A^* est connu, la hauteur de la barrière Schottky peut être calculé après que J_0 soit déterminé à partir de l'équation (I.11),

$$\phi_B = \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{A^* T^2}{J_0} \right) \quad (\text{I.12})$$

Dans la pratique, A^* est inconnu et les mesures $I - V$ dépendants de la température sont utilisés pour déterminer la hauteur de la barrière et la constante de Richardson.

La hauteur de la barrière et la constante de Richardson peuvent être extrait par la méthode de Richardson :

$$\ln \left(\frac{J_0}{T^2} \right) = \ln A^* - \frac{q}{kT} \phi_B \quad (\text{I.13})$$

Cependant, Pour la plupart des (Si et les semi-conducteurs III-V) diodes Schottky, on a observé une déviation de l'émission thermoïonique idéale. On observe aussi que le facteur n d'idéalité augmente considérablement quand la température est abaissée (et est beaucoup plus grand que l'unité à des températures basses). D'ailleurs, les courbes conventionnelle de Richardson $\ln J_0 = f(1/T)$ ne sont pas linéaires. Au lieu de cela, les courbes modifiés $\ln J_0 = f(1/nT)$, qui sont linéaires, sont employés pour extraire la hauteur de la barrière Schottky. Pour les semiconducteurs non dopés ou faiblement dopés, on constate que cette déviation ne peut pas être expliqué par l'effet Schottky, les effets tunnel, ou le courant de recombinaison dans la région de déplétion. Pour expliquer ces anomalies de la barrière Schottky, beaucoup des modèles ont été établis comme les états d'interface, la couche interfaciale. Dans la section suivante, une théorie générale des mécanismes de conduction est brièvement décrite.

I.3.2. THEORIES DE TRANSPORT

Dans une barrière Schottky, différents mécanismes de transport de charges peuvent exister simultanément ou séparément et être responsables du passage du contact.

- Emission d'électrons du semi-conducteur vers le métal au dessus de la barrière.
- Courant dû au passage des électrons à travers la barrière par effet tunnel.
- Recombinaison dans la zone de charge d'espace.
- Recombinaison dans la région neutre.

I.3.2.1. ÉMISSION AU DESSUS DE LA BARRIERE

Dans ce cas, le courant est dû au passage des porteurs au dessus de la barrière. Ce courant a été décrit par plusieurs théories à savoir celle de la diffusion, celle de l'émission thermoïonique ou par une théorie regroupant les deux premières.

La différence entre les théories de diffusion et de l'émission thermoïonique est le comportement de quasi-niveau de Fermi des électrons dans le semi-conducteur. elle peut être récapitulée comme suit [10].

- 1) Dans le cas de l'émission thermoïonique, les électrons du semi-conducteur qui traversent la barrière pour pénétrer dans le métal ne sont pas en équilibre avec ceux de ce dernier. Ce sont des électrons chauds, mobiles dans le métal qui perdent leurs énergies à la suite de collisions. Le quasi-niveau de Fermi est plat dans tout le semi-conducteur et s'abaisse pour rejoindre le niveau de Fermi de métal à l'intérieur du métal.
- 2) Dans le cas de la théorie de diffusion, le quasi-niveau de Fermi coïncide le niveau de Fermi du métal à l'interface.
- 3) Cette différence dans la position des quasis niveaux de Fermi est représentée dans la figure (1.9).
- 4) De façon pratique, la théorie thermoïonique s'applique plus au cas où les électrons ont une forte mobilité dans le semi-conducteur, la théorie de diffusion au cas où les électrons ont une faible mobilité dans le semi-conducteur.

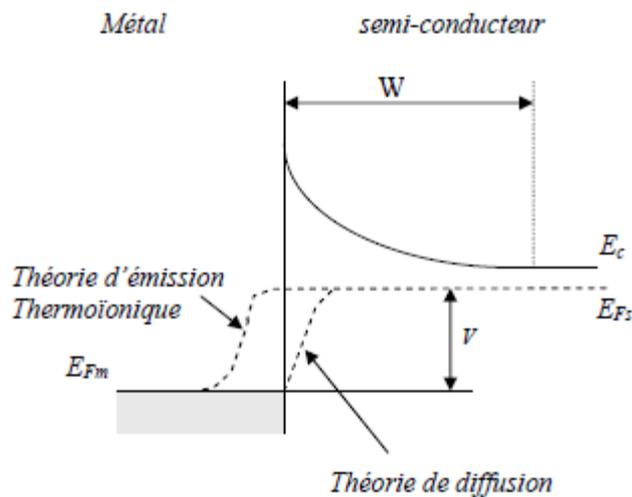


Figure.1.9. : Position du quasi-niveau de Fermi des électrons en polarisation directe

a) Théorie de diffusion

Proposée par Schottky et Spence en 1939 [11], cette théorie suppose que les électrons migrent du semi-conducteur au métal par-dessus la barrière en traversant la zone appauvrie du semi-conducteur, ce qui restreint le courant direct. En effet ce dernier est limité par la diffusion des porteurs à travers le champ électrique dans la zone de charge d'espace à cause du libre parcours moyen des électrons qui est faible devant la largeur de la barrière.

La concentration des électrons dans le côté semi-conducteur de l'interface de M/S est donnée par :

$$n = N_c \exp[-q(E_c - E_F)/kT] \quad (\text{I.14})$$

La densité du courant est donnée par :

$$J = qn\mu E + qD_n \frac{dn}{dx} \quad (\text{I.15})$$

Où E est le champ électrique dans la barrière, D_n le coefficient de diffusion et μ la mobilité d'électron.

L'équation finale de la caractéristique densité du courant-tension est la suivante :

$$J = J_0 \cdot (e^{qV/kT} - 1) \quad (\text{I.16})$$

Où la densité du courant de saturation J_0 est:

$$J_0 = q \cdot N_c \cdot \mu \cdot E_{\max} \cdot \exp\left(-\frac{q\phi_B}{kT}\right) \quad (\text{I.17})$$

Le champ électrique maximum dans la jonction est donné par

$$E_{\max} = qN_D W / \epsilon_s \quad (\text{I.18})$$

W est largeur de la zone de déplétion du semi-conducteur.

b) Théorie de l'émission thermoïonique

Dans la théorie de l'émission thermoïonique, le gradient du quasi-niveau de Fermi est négligé. Ceci implique que le quasi-niveau de Fermi dans le semi-conducteur est plat. La concentration des électrons du côté semi-conducteur de l'interface M/S est augmentée par un facteur $\exp(qV/kT)$ quand une tension de polarisation est appliquée.

$$n = N_c \exp[-q(\phi_B - V)/kT] \quad (\text{I.19})$$

Où N_c est la densité d'états effectifs des électrons dans la bande de conduction du semi-conducteur, ϕ_B la hauteur de la barrière Schottky (en eV) et V la tension appliquée.

La densité du courant dû à l'émission thermoïonique des électrons au dessus de la barrière est donnée par l'expression [5]:

$$J = J_0 \cdot (e^{qV/kT} - 1) \quad (\text{I.20})$$

où $J_0 = A^* T^2 \cdot \exp\left(-\frac{q\phi_B}{kT}\right) \quad (\text{I.21})$

avec : $A^* = 4\pi m^* qk^2 / h^3$

m^* la masse effective des électrons dans le semi-conducteur, h la constante de Planck.

c) Théorie de l'émission-diffusion

La théorie combinée de l'émission thermoïonique-diffusion était présentée d'abord par Crowell et Sze en 1966 [12]. Dans cette théorie on définit une vitesse de recombinaison v_r au maximum potentiel. La densité de courant au sommet de la barrière est :

$$J = q(n_m - n_0)v_r \tag{I.22}$$

où n_m est la densité des électrons à x_m (position du potentiel maximum) quand une tension de polarisation est appliquée.

$$n_m = N_c \exp[-q(\phi_B - \phi(x_m)) / kT] \tag{I.23}$$

où $\phi(x_m)$ est le quasi-niveau de Fermi (en eV) à x_m sous un tension de polarisation V . n_0 est la densité des électrons à x_m sous la condition de quasi-équilibre :

$$n_0 = N_c \exp(-q\phi_B / kT) \tag{I.24}$$

L'expression finale du courant est la même que précédemment (théorie de diffusion et de l'émission thermoïonique), la différence réside au niveau du courant de saturation comme le montre la relation suivante :

$$J = \frac{qN_c v_r}{1 + v_r / v_d} \cdot e^{-q\phi_B / kT} \cdot (e^{qV / kT} - 1) \tag{I.25}$$

où
$$v_d = \left\{ \int_{x_m}^W \frac{q}{\mu kT} \cdot e^{-q(\phi_B - E_c) / kT} \cdot dx \right\}^{-1} \tag{I.26}$$

La vitesse de recombinaison est donnée par :

$$v_r = \frac{A^* T^2}{qN_C} \tag{I.27}$$

1.3.2.2. MECANISMES DE CONDUCTION PAR EFFET TUNNEL

La conduction par effet tunnel est caractérisée par le passage à travers la barrière, des porteurs par effets quanta-mécaniques lorsque leur énergie n'est pas suffisante pour pouvoir la sauter et lorsqu'elle est suffisamment mince pour se laisser traverser. En effet, lorsque le dopage du semi-conducteur augmente, la courbure de la bande à l'interface s'accroît et la largeur de la zone appauvrie diminue, ce qui facilite le passage des électrons à travers la barrière. Plusieurs types de transport par effet tunnel existent parmi les plus intéressants on peut citer :

a) *L'émission par effet de champ (E.C)*

L'émission par effet de champ n'est observée que dans les semi-conducteurs fortement dopés ou dégénérés et à basses températures. Le courant est formé d'électrons ayant des énergies proches de l'énergie de Fermi du semi-conducteur.

Pour une polarisation directe, le passage se fait au bas de la bande de conduction tandis que pour une polarisation inverse, le passage est proche de l'énergie de Fermi du métal comme l'illustrent les figures (1.10) et (1.11).

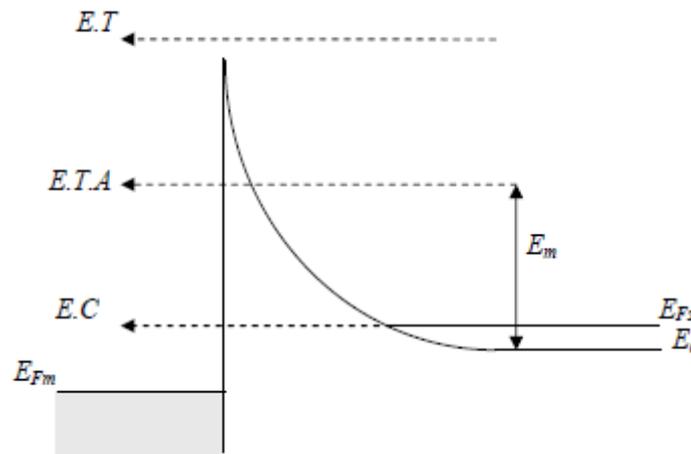


Figure.1.10. : Mécanisme de transport du courant direct dans une barrière Schottky formée sur un semi-conducteur fortement dopé.

Selon C.R.Crowell et V.L.Rideout [13], pour des tensions directes assez grandes, l'expression de la densité du courant en fonction de la tension peut se mettre sous la forme :

$$J = J_0 \cdot \exp\left(\frac{qV}{E_0}\right) \quad (I.28)$$

avec

$$E_0 = E_\infty \coth\left(\frac{E_\infty}{kT}\right) \quad (I.29)$$

Le paramètre E_∞ est défini par :

$$E_\infty = \frac{qh}{4\pi} \left(\frac{N_D}{m^* \epsilon_s} \right)^{1/2}$$

À très basses températures, le terme kT/E_∞ est négligeable devant l'unité, on a alors :

$$E_0 \approx E_\infty .$$

La densité du courant s'écrit :

$$J = J_0 \cdot \exp\left(\frac{qV}{E_\infty}\right)$$

(I.30)

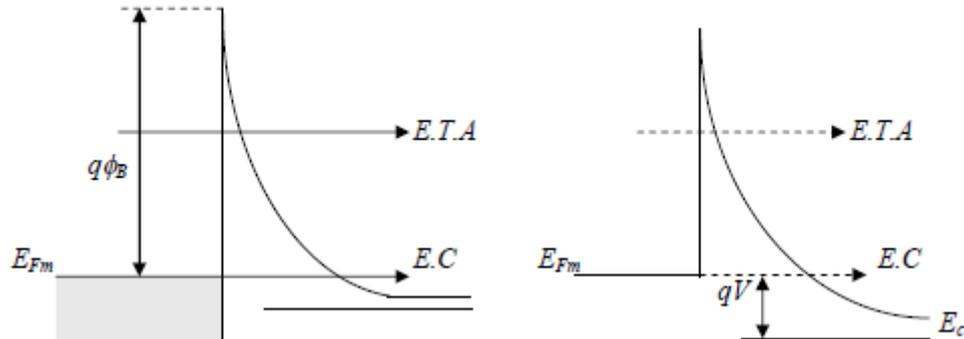


Figure.1.11. : Mécanismes d'effet tunnel dans une diode Schottky polarisée en inverse.

- a) faible polarisation
- b) forte polarisation.

b) L'émission thermoïonique assistée par effet de champ (E.T.A)

Dès que la température augmente, et pour une polarisation directe, les électrons ont une énergie supérieure à l'énergie de Fermi du semiconducteur et inférieure à celle nécessaire pour passer au dessus de la barrière. A ce niveau, la largeur de la zone d'appauvrissement est faible et les électrons la traversent avec une énergie E_m qui représente le maximum de la distribution énergétiques des électrons émis comme le montre la figure (1.10) , ceci correspond à $kT/E_\infty \gg 1$ et la caractéristique I-V a l'expression empirique suivante :

$$J = J_0 \cdot \exp\left(\frac{qV}{nkT}\right) \quad (I.31)$$

avec
$$n = \frac{E_o}{kT} = \frac{E_\infty}{kT} \coth\left(\frac{E_\infty}{kT}\right) \quad (I.32)$$

n étant appelé le facteur d'idéalité de la diode.

1.3.2.3. RECOMBINAISON DANS LA ZONE DE CHARGE D'ESPACE

Le processus de recombinaison dans la région de déplétion dans une diode Schottky est lié à l'existence des centres localisés dans la bande interdite. Selon le modèle de Shockley, Read et Hall (SRH) en 1952 [14], le taux de recombinaison dans la région de déplétion est donné par l'expression suivante :

$$U = \frac{n \cdot p - n_i^2}{\tau_n (n + n_i) + \tau_p (p + n_i)} \quad (I.33)$$

Où τ_n et τ_p sont la durée de vie des électrons et des trous respectivement dans le semi-conducteur. Un seul niveau de piège situé au milieu de la bande interdite et coïncide avec le niveau intrinsèque est supposé. La densité du courant de recombinaison est donnée par :

$$J = q \cdot \int_0^W U(x) dx \quad (I.34)$$

Avec les simplifications suivantes $n, p \gg n_i$, et $\tau_n = \tau_p = \tau$, l'expression de la densité du courant pour des basses tensions positives est donné par :

$$(I.35) \quad J = J_0 \exp(qV / 2kT) [1 - \exp(-qV / kT)]$$

$$\text{Où} \quad J_0 = qn_i W / 2\tau \quad (I.36)$$

n_i : est la concentration intrinsèque des électrons.

W : la largeur de la zone de déplétion.

CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons étudié le comportement des contacts MS et définissant les paramètres physiques gouvernant ce comportement. Généralement, les contacts MS sont redresseurs si le semi-conducteur est de type n et $\phi_m > \phi_s$ ou de type p avec $\phi_m < \phi_s$ et ohmique pour les cas inverse. Cependant, pour certain des cas la hauteur de la barrière de potentiel est indépendante de la nature du métal. J.Bardeen en 1947, a montré que ceci était dû à la présence des états de surface existant sur le semi-conducteur. L'échange de charges par le semi-conducteur va donc se faire avec ces états. A.M.Cowley et S.M.Sze, ont proposé une théorie unifiant celle de Schottky et celle de Bardeen. Ils supposent l'existence entre les deux corps d'une couche interfaciale mince d'épaisseur D_i . Kurtin, McGill, et Mead ont assumés que la hauteur du barrière dépend linéairement du travail de sortie du métal où la pente dépend à son rôle par l'ionicté de liaisons des semi-conducteurs. Heine dans son modèle et au lieu des états de surface souligne le rôle des (MIGS) qui sont des énergies dans le gap fondamental de semi-conducteur, et affaiblissent exponentiellement du côté semi-conducteur de la jonction. Les queues de MIGS peuvent stocker une charge dans le semi-conducteur, à une certaine distance de la surface du métal, comme dans le cas des états de surface. Andrews et Phillips dans leur étude de la chaleur de formation des siliciures ont proposé une pertinence entre les liaisons de la structure à l'interface et la hauteur de barrière. Enfin, l'issue de ce qui sont les paramètres et les mécanismes physiques qui déterminent la valeur des SBH restent ouverts.

Concernant les mécanismes de conduction dans les diodes Schottky, nous avons montré que Les caractéristiques courant-tension d'une diode Schottky sont généralement décrit par l'émission thermoïonique donnée par la relation $J = J_0 \cdot (e^{qV / nkT} - 1)$,

Cependant, Pour la plupart des diodes Schottky (Si et les semi-conducteurs III-V), il y a une déviation de l'émission thermoionique idéale. On constate que cette déviation peut être expliquée par l'effet Schottky, les effets tunnel, le courant de recombinaison dans la région de déplétion, l'effet des états d'interface et de la couche interfaciale.

CHAPITRE II : PROPRIETES ELECTRIQUES DES STRUCTURES METAL/SEMICONDUCTEUR

INTRODUCTION

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à l'étude de la simulation électrique de la structure Schottky obtenue par ATHENA. Cette étude du comportement électrique se fera au moyen de l'outil ATLAS-TCAD qui permet d'extrapoler le comportement électrique du composant électronique en se basant sur des modèles spécifiques pour chaque phénomène.

Dans un premier temps, nous présenterons la structure à modélisé puis on va présenter leurs propriétés électriques (mobilités et densités des porteurs, diagramme des bandes, potentiel et champ électrique, courant électrique) et l'effet de changement de travail de sortie, de concentration de dopage, d'épaisseur de la couche épitaxiale, de température, et des centres pièges sur ces propriétés. Enfin, Nous allons effectuer des études sur l'effet d'ajout d'une plaque de champ et des anneaux de gardes sur la performance et la fiabilité de la structure. La variation des caractéristiques inverse de claquage en fonction de la température dans la gamme de 300-1000 K est également présentée.

II.1. STRUCTURE MODELISEE

Les diodes Schottky caractérisées sont produites à partir d'un substrat fortement dopée (typiquement $N_D = 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) pour assurer une faible résistance série de la base du composant. D'autre part, le substrat est épitaxié pour créer la couche faiblement dopée destinée à tenir la tension inverse. La couche épitaxiée est dopée N_a à $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ et de $2 \mu\text{m}$ d'épaisseur. Le contact en face arrière, que doit avoir la plus faible résistance possible, est réalisé par un dépôt d'aluminium (Al) pour établir un contact ohmique. Le cobalt (Co) qui a une grande fonction de travail a été déposé sur la surface de la plaquette pour établir un contact Schottky, les différents paramètres de cobalt sont bien défini dans la bibliothèque de matériaux d'Atlas (Annexe B).

La Figure.2.1 présente la structure de dispositif simulé, la diode Schottky peut être modélisée comme étant l'addition d'une diode idéale, résumée aux effets redresseurs ayant lieu au niveau du contact Schottky (tension de seuil comprise) et de divers effets résistifs, dus à la contribution de R_D , la résistance de drift, R_{Sub} , la résistance du substrat fortement dopé et R_C , la résistance du contact ohmique. Ces différentes résistances peuvent être résumées sous l'appellation de résistance série.

Puisque maillage à l'interface est très important, et puisque le nombre maximum des noeuds qui peuvent être mis en œuvre en ATLAS est 20.000. Ainsi, la structure remaillé en

ATLAS est fourni des noeuds suffisants dans les régions critiques et moins de noeuds dans la région volumique.

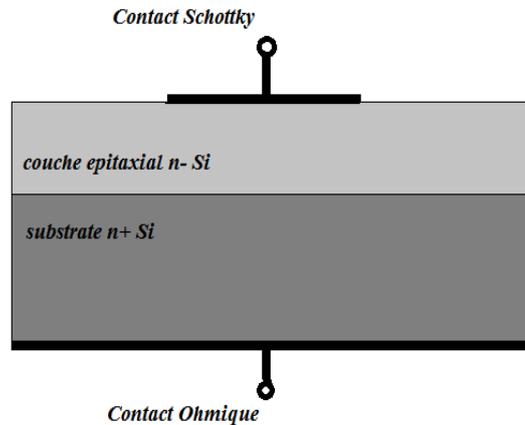


Figure.2.1 coupe d'une diode Schottky et représentation des différentes résistances équivalentes lors de son fonctionnement en direct.

Dans le logiciel de simulation physique, il existe de nombreux modèles à sélectionner judicieusement selon l'application. La statistique de Fermi-Dirac est préférable à celle de Boltzmann dès lors que la densité de porteurs dans les zones actives est supérieure à 10^{18} cm^{-3} . Les mobilités des porteurs dans le semiconducteur doivent être fonction du champ électrique et de la concentration des porteurs libres (phénomène de dispersion). La dépendance de la mobilité avec la concentration en porteurs libres est activée en spécifiant le paramètre *conmob*. Concernant la dépendance de la mobilité avec le champ électrique, le modèle utilisé est celui de Caughey et Thomas, Ce modèle est activé en spécifiant le paramètre *fldmob*.

Le modèle de recombinaisons utilisé est celui de Shockley-Read-Hall et d'Auger. La durée de vie des porteurs sera fonction du dopage et donc le taux de recombinaisons SRH dépendra du niveau de dopage dans chaque zone.

II.2. ANALYSE DES RESULTATS

II.2.1. PROFIL DE DOPAGE ET MOBILITES DES PORTEURS

Dans le logiciel de simulation SILVACO, nous avons choisi de ne pas considérer les jonctions purement abruptes mais de décrire de la manière la plus fidèle possible le profil de dopage dans la diode conformément à une diode réelle. Ce profil de dopage tient compte de la diffusion non intentionnelle de porteurs du substrat n+ vers la zone n- lors de l'épitaxie de cette zone.

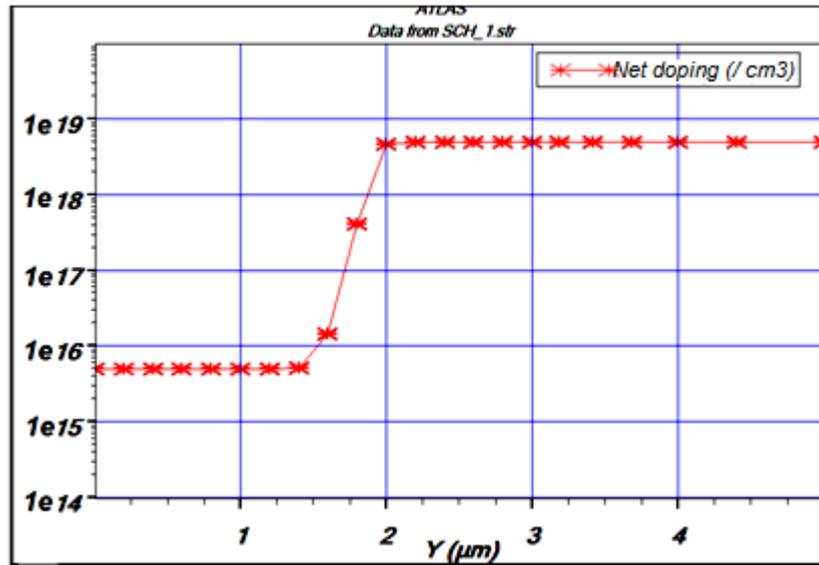


Figure. 2.2 – Profil de dopage dans le simulateur SILVACO pour une diode Co/Si-n Schottky d'épaisseur 5µm.

La figure. 2.2 montre le profil de dopage qui a été implante dans le simulateur de procédés technologiques ATHENA puis dans le simulateur physique ATLAS pour une diode Schottky d'épaisseur 5µm.

L'étude de la mobilité permet de se rendre compte des importantes variations de mobilité qui ont lieux dans la diode Schottky. Les électrons et les trous sont accélérés par le champ électrique, mais perdent l'élan à la suite de divers processus de diffusion. Ces mécanismes de diffusion comprennent des vibrations du réseau (phonons), des ions d'impuretés, d'autres porteurs, des surfaces et autres imperfections matérielles. Comme les effets de tous ces phénomènes microscopiques sont regroupés dans les mobilités macroscopiques introduites par les équations de transport, ces mobilités sont donc des fonctions du champ électrique local, la température du réseau, concentration de dopage, concentration de porteurs et ainsi de suite. Les mobilités atteignent un maximum lorsque les concentrations sont au minimum dans la zone épitaxiale.

La figure. 2.3 représente les mobilités d'électrons et de trous en polarisation directe. Dans la zone n+, les mobilités sont réduites du fait des concentrations en atomes dopants qui sont importantes. Dans la zone épitaxiale, les mobilités sont beaucoup plus importantes car le niveau de dopage est très faible. Les mobilités varient avec les concentrations de porteurs du fait des phénomènes de dispersions entre porteurs dus à l'importante agitation des électrons et trous dans le réseau cristallin.

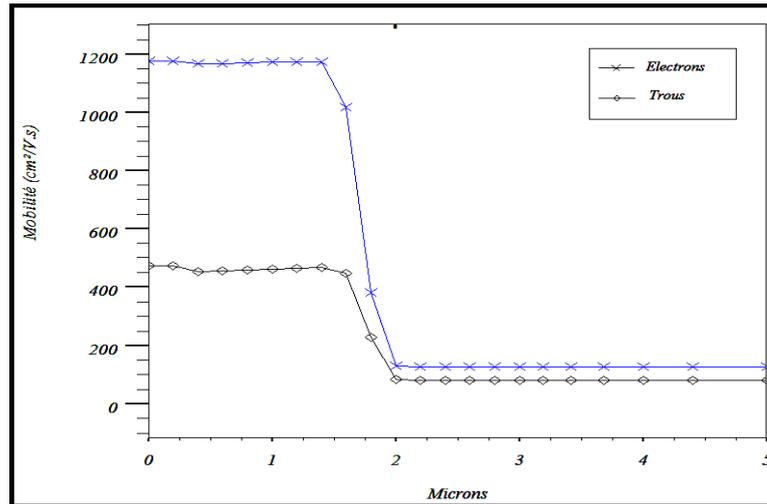


Figure. 2.3 – Mobilités des porteurs dans la diode Schottky simulée en régime de forte injection

II.2.2. DENSITES DE PORTEURS ET DIAGRAMME DES BANDES

Dans la physique de semi-conducteurs le diagramme des bandes est un diagramme qui nous montre les variations des limites des bandes de valence et de conduction en fonction d'une dimension spatiale. Dans notre cas cette dimension spatiale, notée y , représente la direction volumique de la diode.

Dans la figure 2.4 nous avons représenté le diagramme de bande à l'équilibre thermodynamique, en forte injection directe et en polarisation inverse pour une diode Schottky de $5\mu\text{m}$ d'épaisseur. Nous avons représenté, E_C le niveau de la bande de conduction, E_V le niveau de la bande de valence, E_{FN} et E_{FP} les quasi niveaux de Fermi pour les électrons et les trous. Le 0 eV de référence représente le niveau du Fermi à l'équilibre thermodynamique. Cette valeur est la référence dans les calculs et non pas le niveau du vide. Nous remarquons qu'à l'équilibre thermodynamique les quasis niveaux de Fermi s'alignent à 0 eV , mais en polarisation directe, E_{FN} commence à diminuer dans la zone épitaxiale en raison de la diminution de la concentration des électrons dans la zone ZCE (régime de déplétion).

Les quasis niveaux de Fermi sont liés aux concentrations de porteurs et au potentiel par les deux approximations (Annexe A):

$$E_{fn} = q\psi + \frac{KT}{q} \ln \frac{n}{n_i} \quad (\text{II.1})$$

$$E_{fp} = q\psi - \frac{KT}{q} \ln \frac{p}{n_i} \quad (\text{II.2})$$

Avec $n, p > n_i$

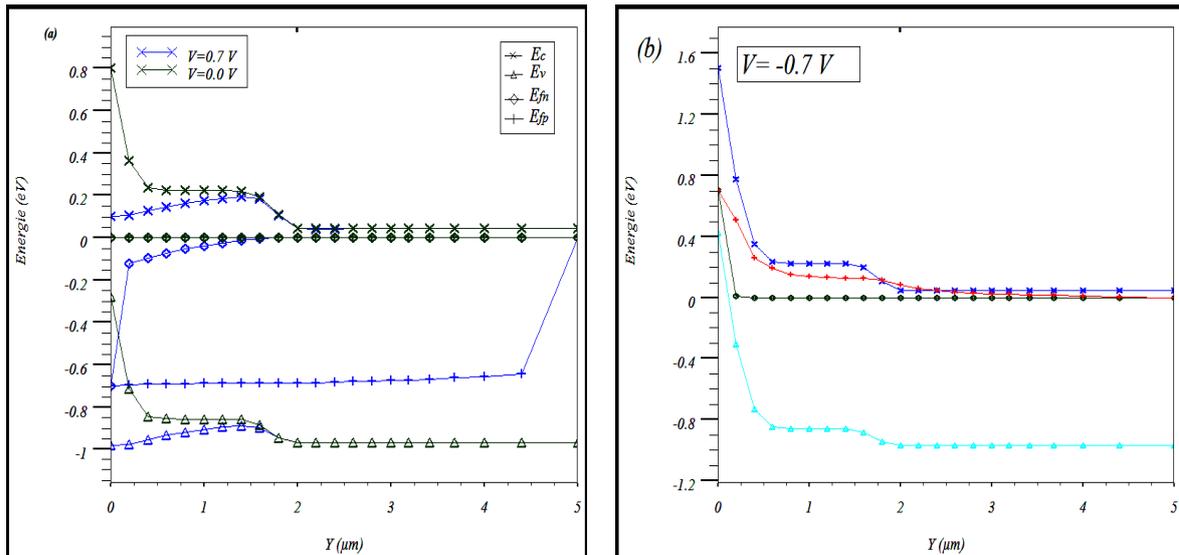


Figure. 2.4. Diagrammes des bandes (a) à 0.0V et 0.7V, (b) à -0.7V pour la diode simulée.

Généralement dans la zone épitaxiale, les bandes présentent un creux de potentiel du au contact semiconducteur/ semiconducteur ce phénomène accélère la freine des électrons.

Sur la figure 2.5 nous avons représenté une étude comparative entre les concentrations des électrons et des trous en polarisation directe, nulle et inverse pour une la diode Schottky simulée. Sur ces courbes, on peut observer que le profil des concentrations des porteurs se répartir en trois régions :

- Dans la région de déplétion, la densité d'électrons qui sont les porteurs majoritaires est faible en raison de passage de ces derniers du semi-conducteur vers le métal, par comparaison, la densité de trous dans cette région est plus grande que dans les autres régions, il apparaît donc une zone de charge d'espace positive dans le semiconducteur. Lorsqu'on polarise la structure par une tension V , supposée positive (dans le sens direct), la largeur de la zone de déplétion est plus faible, la barrière de potentiel que doivent franchir les électrons pour passer dans le métal est réduite (voir la figure 2.5), ce qui facilite la diffusion des électrons du semiconducteur vers le métal. En polarisation inverse, la zone de charge d'espace s'élargit, la hauteur de la barrière de potentiel augmente ce qui empêche la diffusion des électrons.

- Dans la région non déplétée de la couche épitaxiale, la concentration d'électrons y est pratiquement constant tandis que, la concentration de trous en polarisation directe reste élevée et être presque égale à la densité d'électrons.

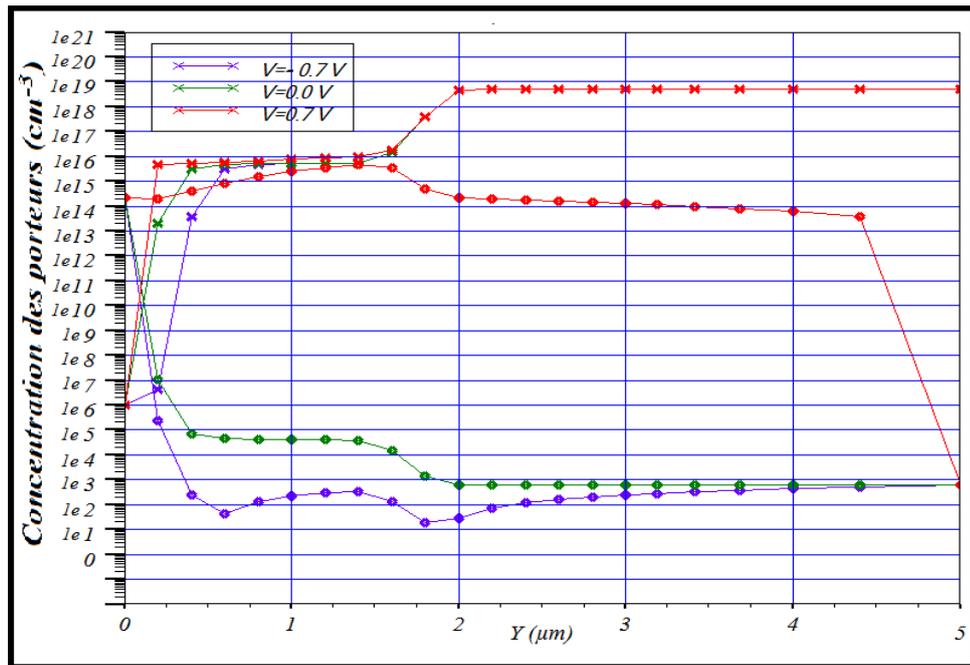


Figure. 2.5. Densités de porteurs en polarisation directe, nulle et inverse.

- Au voisinage de la jonction n-/n+, la concentration d'électrons augmente tandis que la densité des trous diminue pour atteindre la densité du dopage du substrat.

II.2.3. POTENTIEL ET CHAMP ELECTRIQUE

En l'absence de polarisation, L'étude du champ électrique montre qu'en réalité il existe deux zones de charge d'espace dans la diode au voisinage de chaque jonction (se forme au contact métallique redresseur et à la frontière de la zone n-). L'observation du champ électrique dans la figure 2.6.b illustre bien le phénomène.

Le champ électrique s'annule totalement au coeur de la zone n-. La zone de charge d'espace à cette jonction est donc de largeur faible et ceci du fait que le dopage des zones n- et n+ est de même nature. En l'absence de polarisation, seule la ZCE au contact métal/n- est à considérer.

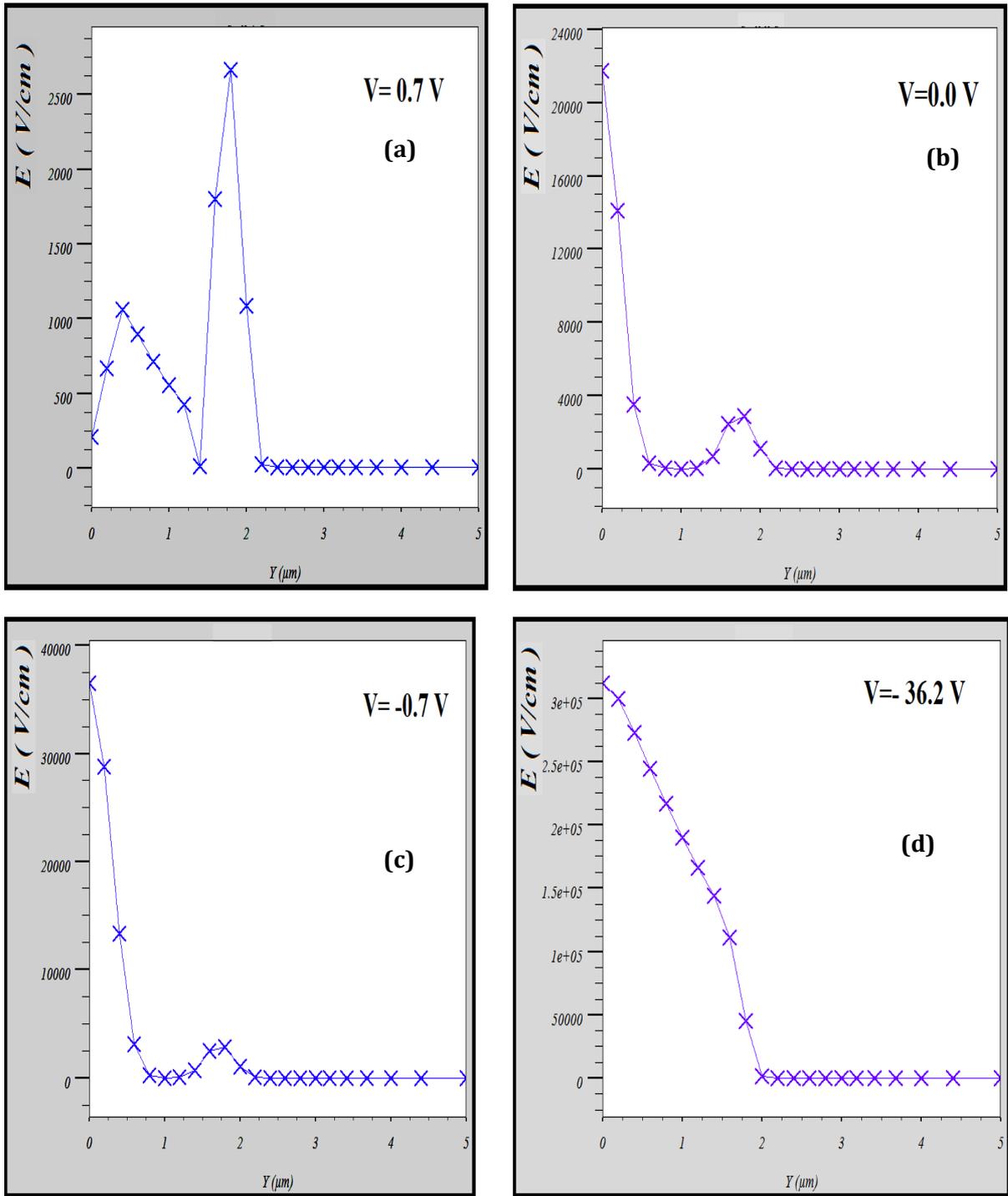


Figure. 2.6 Profil de champ électrique pour une diode Co/Si-n Schottky en polarisation directe, nulle et inverse.

Nous pouvons prévoir ainsi le profil du potentiel électrostatique dans la diode en l'absence de polarisation. Ce profil se décompose en trois zones :

- Une première partie due à la ZCE au contact métal/n-, le potentiel augmente rapidement dans cette zone du fait de la présence d'un métal.

- Une seconde partie est due à la ZCE dans une partie de la zone n-. Dans cette zone, le potentiel y est pratiquement constant en raison du faible niveau de dopage.

- Enfin, une dernière partie de la caractéristique du potentiel est induite par la seconde ZCE de faible largeur au niveau de la jonction n-/ n+.

La figure 2.7 représente le potentiel électrostatique simulé dans la diode et illustre les zones énoncées précédemment. Lorsqu'on polarise la structure, la tension de polarisation se localise au niveau de la zone de déplétion. Si la structure est polarisée par une tension V, supposée positive, la barrière de potentiel que doivent franchir les électrons pour passer dans le métal est réduite (comme le montre la figure .2.7).

En forte injection positive, le champ électrique est faible dans une grande partie de la zone épitaxiale en raison de l'égale concentration des électrons et des trous. Un champ électrique important subsiste au niveau de la jonction n-/ n+ en raison de la zone de charge d'espace résiduelles. Cette ZCE résiduelle est mince, elle est de l'ordre de 0.6µm d'épaisseur (figure .2.6.a).

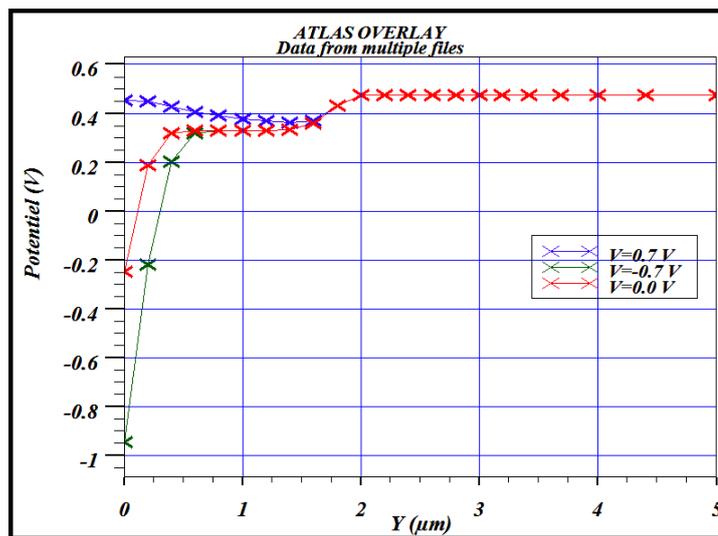


Figure. 2.7 – Profil de potentiel pour une diode Co/ Si-n Schottky en polarisation directe, nulle et inverse.

Quand une polarisation inverse est appliquée à la diode Schottky, la tension est soutenue à travers la région épitaxiale, avec un champ électrique maximum situé au contact métal/semiconducteur (figure .2.6.c). La hauteur de la barrière de potentiel qui s'opposait à la diffusion des électrons augmente et crée une zone de charge d'espace plus large s'étendant dans le semiconducteur. Le champ électrique E au contact Schottky augmente avec la racine de la tension appliquée V selon l'équation (II.3) :

$$E = \sqrt{\frac{2qN_D V}{\epsilon_s}} \quad (\text{II.3})$$

Quand ce champ devient égal au champ critique caractérisant le semiconducteur, le dispositif va subir à l'effet d'avalanche. Pour une structure idéale à la tension de claquage, la largeur de la zone de déplétion est égale à l'épaisseur de la couche épitaxiale (figure 2.6.d). Donc la tension de polarisation inverse V_B est donnée par :

$$V_B = \frac{qN_D W^2}{2\epsilon_s} \quad (\text{II.4})$$

La tension de claquage est contrainte par le claquage aux bords du contact où le champ de claquage est très important. Des terminaisons de bord ont été développées pour soulever la tension de claquage des structures tels que les périphéries *planar et* périphéries *MESA*.

Dans le cas d'une polarisation directe, le champ électrique dans la diode reste faible même dans le cas d'une forte densité de courant. La zone faiblement dopée où la densité de porteurs est limitée est celle où le champ électrique est le plus important. Par contraire, le champ électrique au niveau de la jonction n-/n+ est plus faible en polarisation inverse que en polarisation directe.

II.2.4. COURANT ELECTRIQUE

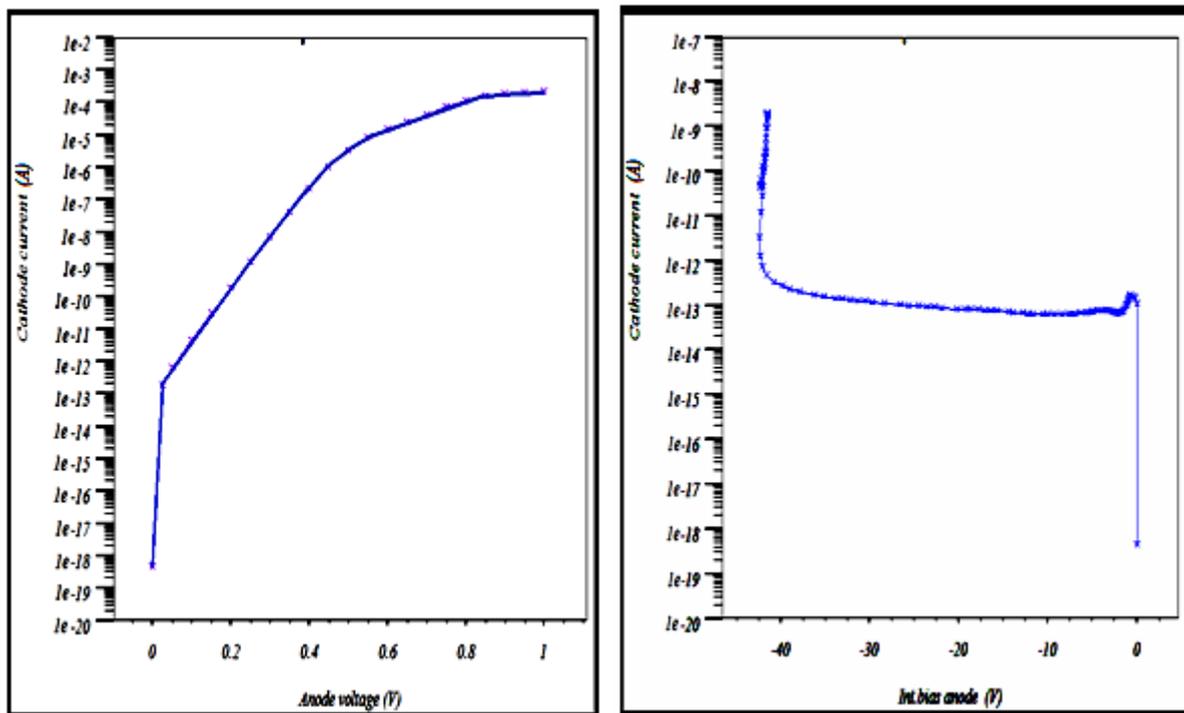


Figure.2.8: Caractéristique I-V de la structure Schottky simulée en polarisation directe et inverse.

L'allure des caractéristiques courant-tension en polarisation directe et inverse est représentée dans la figure 2.8. La circulation du courant à travers la jonction métal/semiconducteur peut être produit par l'application d'une polarisation négative à la région de type N de semi-conducteur. Le courant dans les structures Schottky est alors dû essentiellement aux porteurs majoritaires, il est transporté par les électrons dans le cas d'une structure de type N et par les trous dans le cas d'une structure de type P. La diode de Schottky est donc un dispositif unipolaire qui fonctionne sans l'effet de modulation de porteurs injectés. La figure 2.9 illustre bien ce phénomène.

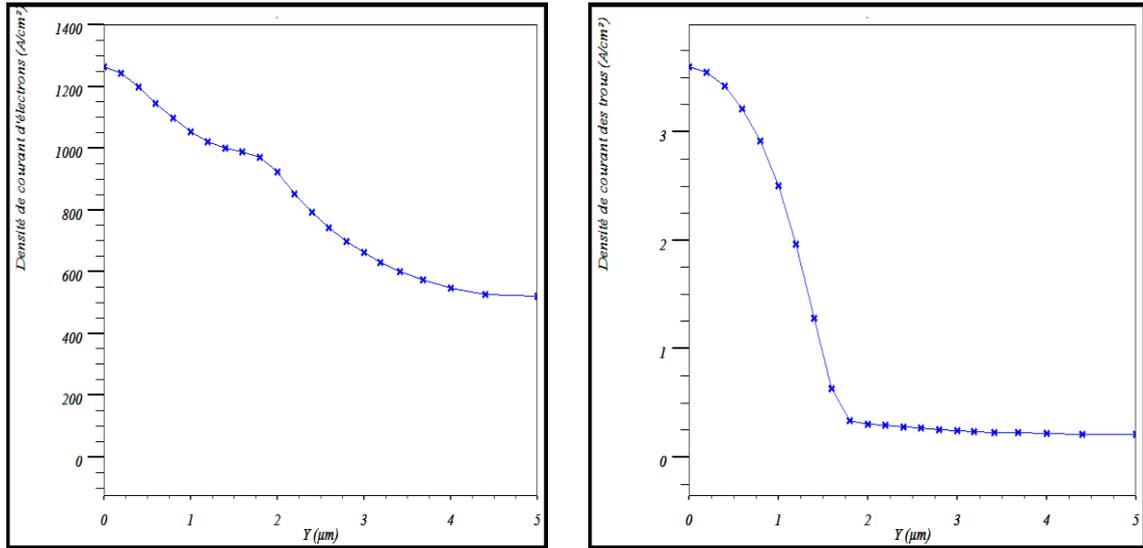


Figure.2.9: Densités de courants des électrons et de trous en régime de forte injection.

En polarisation directe, le courant a une allure exponentielle avec la tension appliquée à l'échelle linéaire. À l'échelle semi-logarithmique, le courant augmente linéairement sur environ 9 décades avec la tension appliquée jusqu'à ~ 0.7 V comme le montre la figure.2.8.a, mais dévie considérablement de la linéarité due à l'effet de la résistance série des contacts ohmiques qui devient importante. Le courant initial I_0 qui se forme dans la région de déplétion est 4.578×10^{19} A/ μm , Le facteur de redressement courant direct sur courant inverse à 1V est supérieur à 10^9 .

La caractéristique inverse décrit le comportement statique de la diode en polarisation inverse, c'est-à-dire la caractéristique courant - tension de la diode bloquée. La figure 2.8 montre que le courant se sature à $I \approx 10^{-13}$ A/ μm , et que la branche directe, commence avec la même résistivité que la branche inverse, cette résistivité est déterminée par la zone de déplétion qui s'élargit sous une tension inverse, ce qui traduit leur instabilité. Cette figure montre aussi que le claquage se produit à $V = -42.27$ V pour un champ électrique de 4×10^5 V/cm, et un dopage de 5×10^{15} de la zone épitaxiale.

La tension inverse supportée par la diode, Schottky ou bipolaire, s'accompagne d'un courant de fuite intrinsèque au fonctionnement du semiconducteur, et qui fait appel à des phénomènes différents suivant le type de semiconducteur et la technologie mise en oeuvre.

Dans une jonction Schottky, on observe un abaissement de la hauteur de barrière de Schottky (effet Schottky). C'est un phénomène intrinsèque, inhérent à la nature même de la jonction Schottky.

La figure 2.10 montre que le phénomène d'abaissement de barrière est négligeable en polarisation directe essentiellement pour les basses tensions positive car le champ électrique y est faible. C'est un phénomène en revanche bien visible en forte polarisation inverse, où l'abaissement de barrière augmente sensiblement l'émission thermoélectronique de la barrière de Schottky. Le fort champ en polarisation inverse conduit à des fuites par effet Schottky, les courants inverses sont supérieurs à ceux attendait par la théorie d'émission thermoélectronique.

Pour des champs élevés, il faut tenir compte de l'effet tunnel qui peut apparaître dans la jonction. Dans certains cas les électrons peuvent traverser la barrière de potentiel lorsqu'elle est très mince, ou sous l'effet du champ extérieur qui diminue la largeur de la barrière. La contribution de l'effet tunnel aux caractéristiques courant-tension est représentée dans la figure 2.11.

En polarisation directe l'effet tunnel est négligeable quelque soit la concentration du dopage, tandis qu'en polarisation inverse, La diode simulée présente un courant tunnel important devant le courant thermoélectronique.

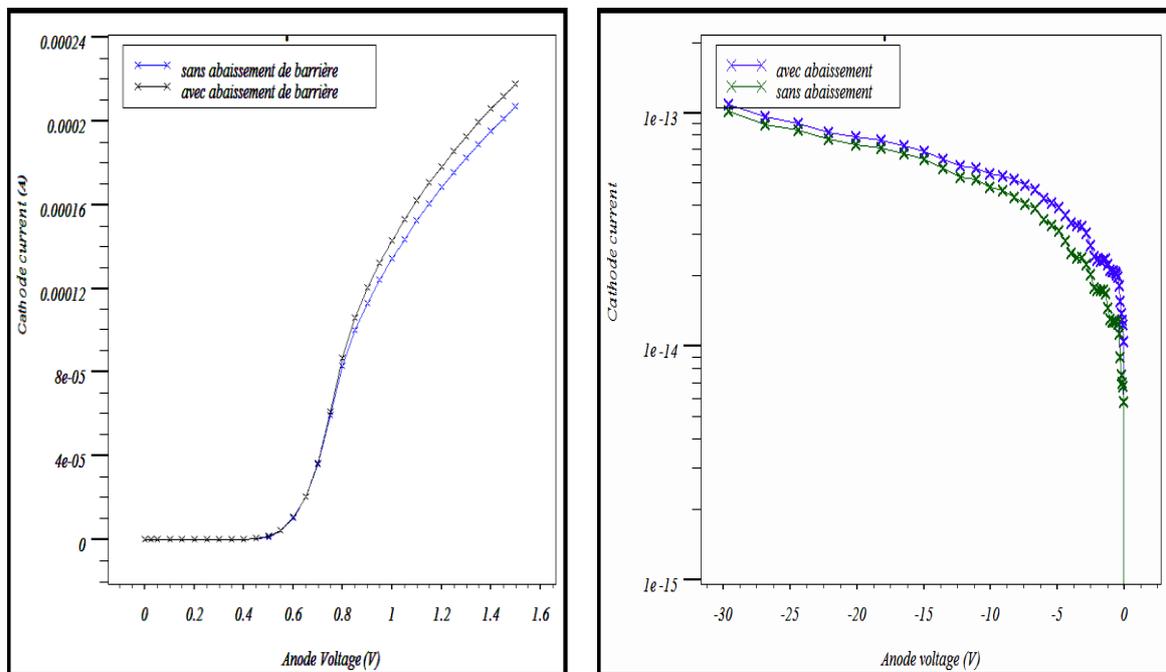


Figure 2.10 : Contribution du l'effet Schottky aux caractéristiques courant-tension de la structure simulée.

Le champ important peut être obtenu en sur-dopant le semiconducteur. En effet le champ E est grossièrement proportionnel au dopage et génère un courant élevée. Il est évident aussi à partir de cette figure que le dopage faible de la couche épitaxiale entraîne une augmentation de la tension de claquage, ce qui est dû à une diminution du champ électrique

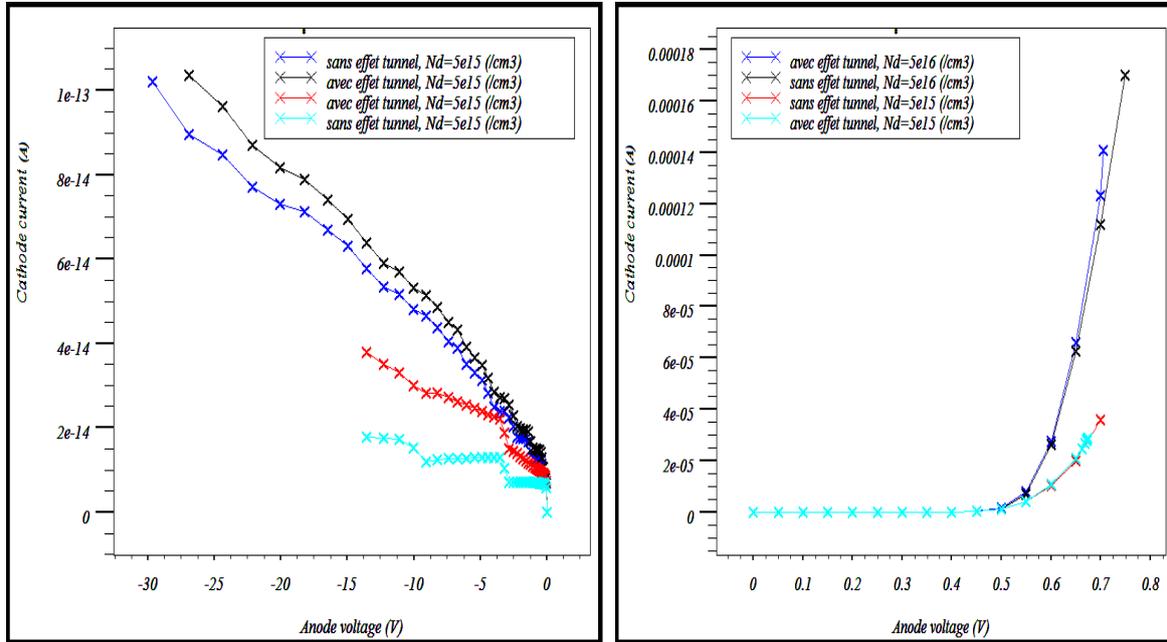


Figure 2.11 : Contribution du courant tunnel aux caractéristiques courant-tension de la structure simulée pour deux concentrations du dopage.

II.2.5. EFFET DE CHANGEMENT DE TRAVAIL DE SORTIE

La configuration d'un contact Schottky, son exécution et fiabilité sont rigoureusement déterminées par la qualité d'interface entre le métal déposé et la surface de semi-conducteur.

L'effet du choix des métaux avec différents travaux de sortie sur la caractéristique électrique courant-tension de la structure est montré sur la figure.2.12. On peut aisément remarquer que pour W_f supérieur à une certaine valeur W_{fc} , la caractéristique I-V est semblable à celle d'une diode conventionnelle :

$$I = I_0(e^{\beta V} - 1) \quad (II.5)$$

Et au-delà de cette valeur ($W_f < W_{fc}$), l'expression précédente n'est plus applicable.

On constate aussi que pour les grandes valeurs de W_f , le courant est très faible car dans cet intervalle, la surface du semiconducteur est en régime d'inversion. La valeur de W_{fc} sera obtenue en écrivant l'expression donnant tension d'établissement du régime de bandes plates. Selon cette équation, pour avoir un dispositif à l'équilibre thermique en régime de déplétion, il faut donc choisir un matériau dont le travail de sortie $W_f > 4.7$ eV.

On peut observer que les courbes représentant les variations I-V avec les différentes valeurs de W_f se répartissent en deux régions :

○ Dans la région où $W_f > 4.7$ eV, le semi-conducteur est en régime de déplétion ou de forte inversion ($W_f > 5.1$ eV). L'état du contact est proche de l'équilibre et le courant total est d'autant plus faible que le dispositif est en régime de forte inversion.

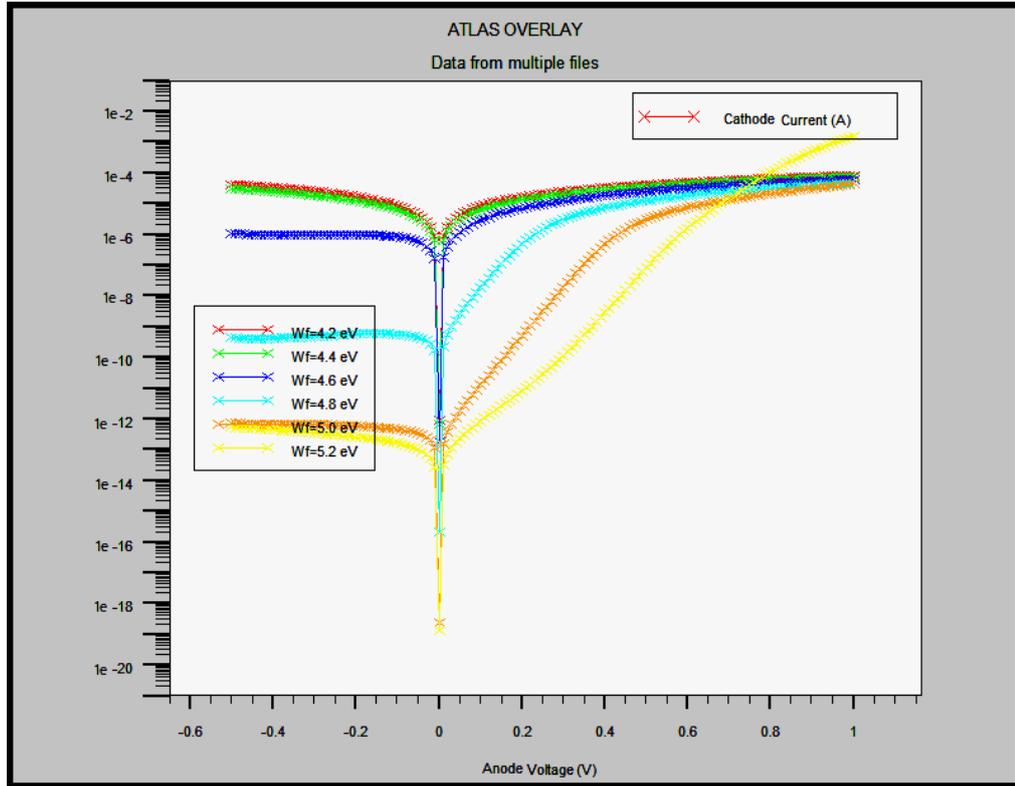


figure.2.12: caractéristique I – V de la structure Schottky pour différents travaux de sortie du métal (semi-conducteur de type N).

Pour les grandes valeurs de tension de polarisation directe et où le potentiel de surface devient négatif, la condition d'équilibre est non satisfaite et la relation entre courant tension est très compliquée.

○ Dans la région où $W_f < 4.7$ eV, le potentiel de surface augmente avec l'augmentation de W_f . La concentration des électrons à la surface diminue. Le courant tunnel des porteurs majoritaires devient important seulement pour les très faibles valeurs de W_f . L'expression du courant en fonction de la tension est complexe.

II.2.6. EFFET DE CHANGEMENT DE CONCENTRATION DE DOPAGE ET EPAISSEUR DE LA COUCHE EPITAXIALE

Pour observer l'effet de concentration du dopage de la couche épitaxiale sur le comportement électrique de la structure Schottky, nous avons tracé les caractéristiques $I-V$ en fonction de ce dernier dans la gamme de 10^{14} - 10^{17} cm^{-3} . La figure.2.13.a représente la variation de ces caractéristiques $I - V$ par rapport à celle de la concentration de dopage de la couche épitaxiale.

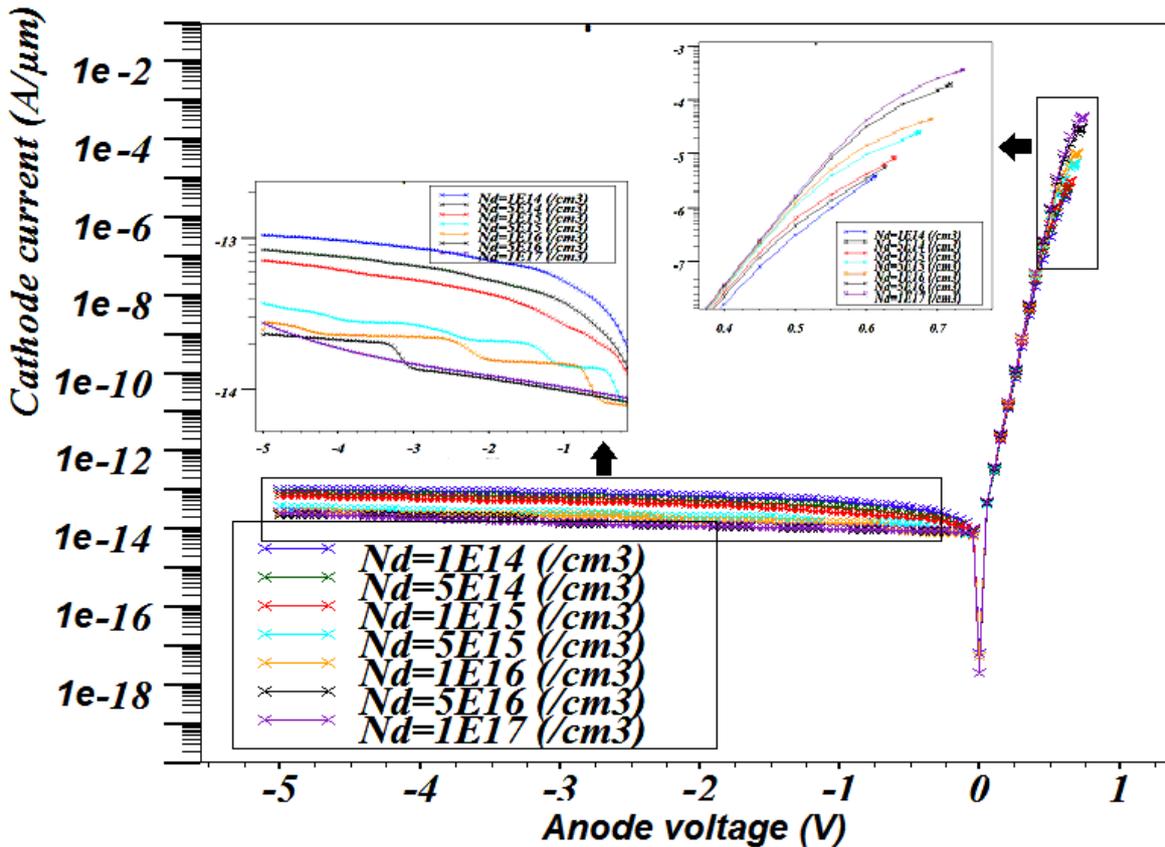


Figure.2.13.a: Caractéristiques $I-V$ pour différents concentrations de dopage de la couche épitaxiale.

Nous avons défini le potentiel de diffusion V_D de la diode Schottky, la tension sous laquelle le courant augmente exponentiellement. Selon la figure.2.13.a, on peut voir que le courant et le potentiel de diffusion augmentent légèrement quand la concentration des impuretés augmente, ceci est équivalent au système proche de l'état d'équilibre. Cette augmentation peut être interprétée par l'augmentation du champ électrique pour les faibles densités du dopage (figure.2.13.b). La densité du courant à l'échelle semi logarithmique montre un contact ohmique pour les grandes valeurs de tensions positives pour toutes les concentrations du dopage. Le courant total en polarisation directe est dû principalement au courant de diffusion. Par contre, en polarisation inverse le courant augmente avec la

diminution de densité du dopage et le courant tunnel devient plus important pour les concentrations élevées et les grandes tensions négatives.

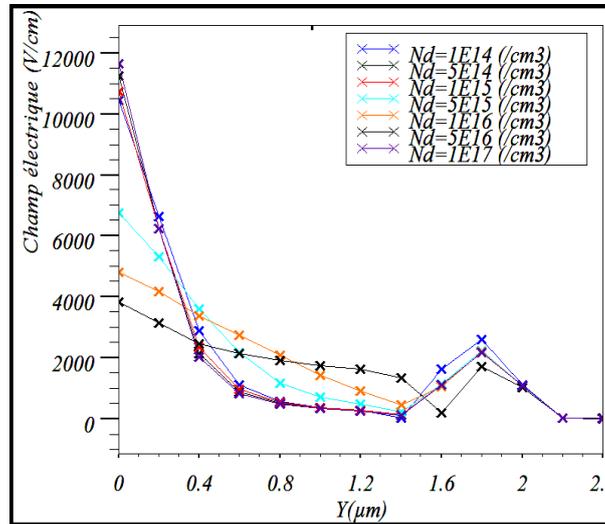


Figure.2.13.b: Variation du champ électrique pour différents concentrations de dopage de la couche épitaxiale.

Sur la figure.2.14 nous avons représenté la variation des caractéristiques $I - V$ pour différentes valeurs d'épaisseur de la couche épitaxiale en polarisation directe et polarisation inverse faible.

En polarisation directe, nous avons trouvé que le courant diminue lorsqu'on varie l'épaisseur de $1\mu\text{m}$ à $3.5\mu\text{m}$ pour une densité constante $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ de dopage. Ce comportement est dû essentiellement à l'augmentation de la résistance série. En polarisation inverse, les valeurs sélectionnées de l'épaisseur et de la densité du dopage de la couche épitaxiale déterminent directement la tension de claquage du composant. La variation de l'épaisseur de $1\mu\text{m}$ à $2\mu\text{m}$ à une concentration constante $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ de dopage engendre une augmentation de la tension de claquage dû à l'élargissement de la zone de déplétion et l'étalement des lignes du champ électrique mais à partir de $2\mu\text{m}$, cette tension commence à diminuer (figure.2.14.b), tandis que l'augmentation de la concentration du dopage montre une diminution de la tension de claquage. Par conséquent, nous concluons que le courant direct et la tension de claquage ont une forte relation, inverse entre l'épaisseur et la densité de dopage de la couche épitaxiale.

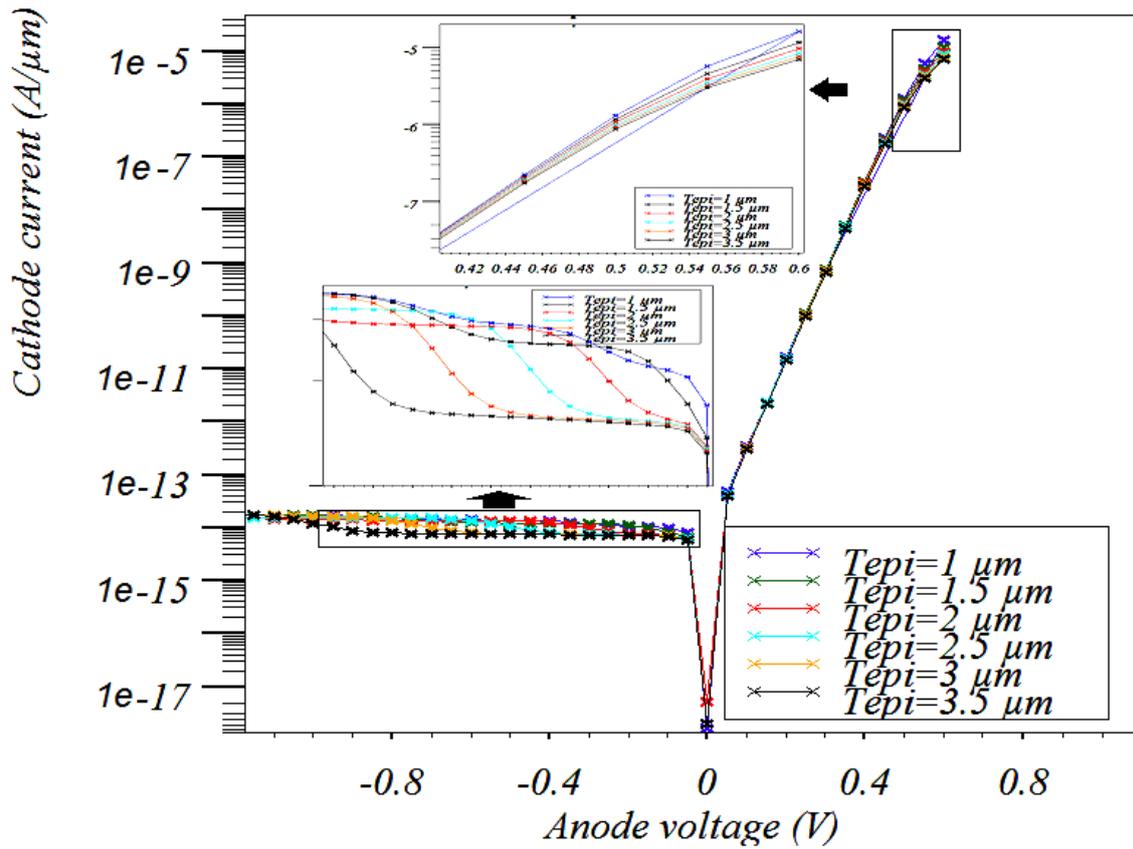


Figure.2.14.a: Caractéristiques I-V pour différents épaisseurs de la couche épitaxiale.

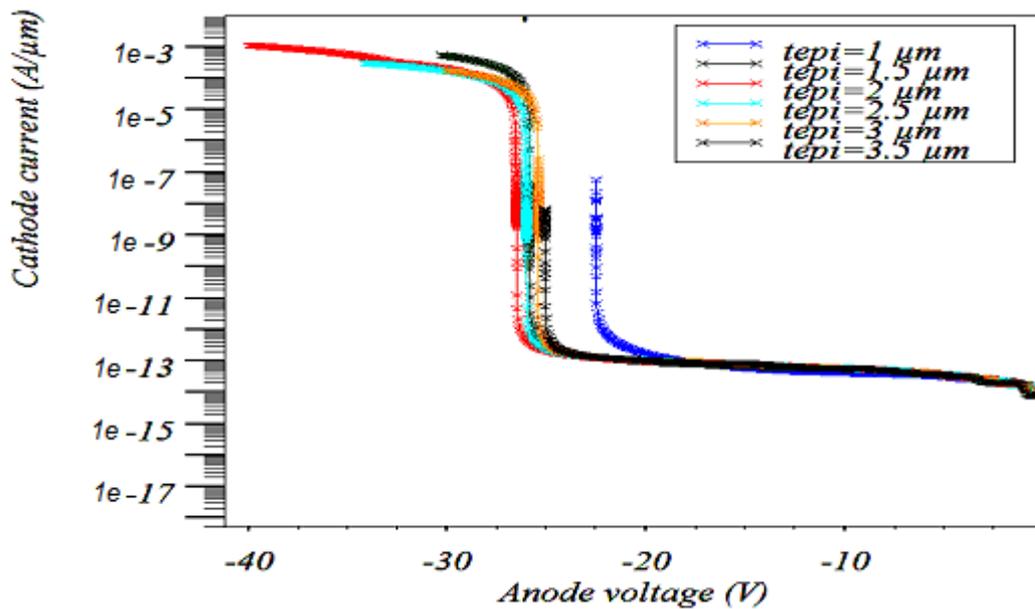


Figure.2.14.b: Caractéristiques I-V montrant la variation de la tension de claquage pour différents épaisseurs de la couche épitaxiale en polarisation inverse.

II.2.7. EFFET DE CHANGEMENT DE TEMPERATURE

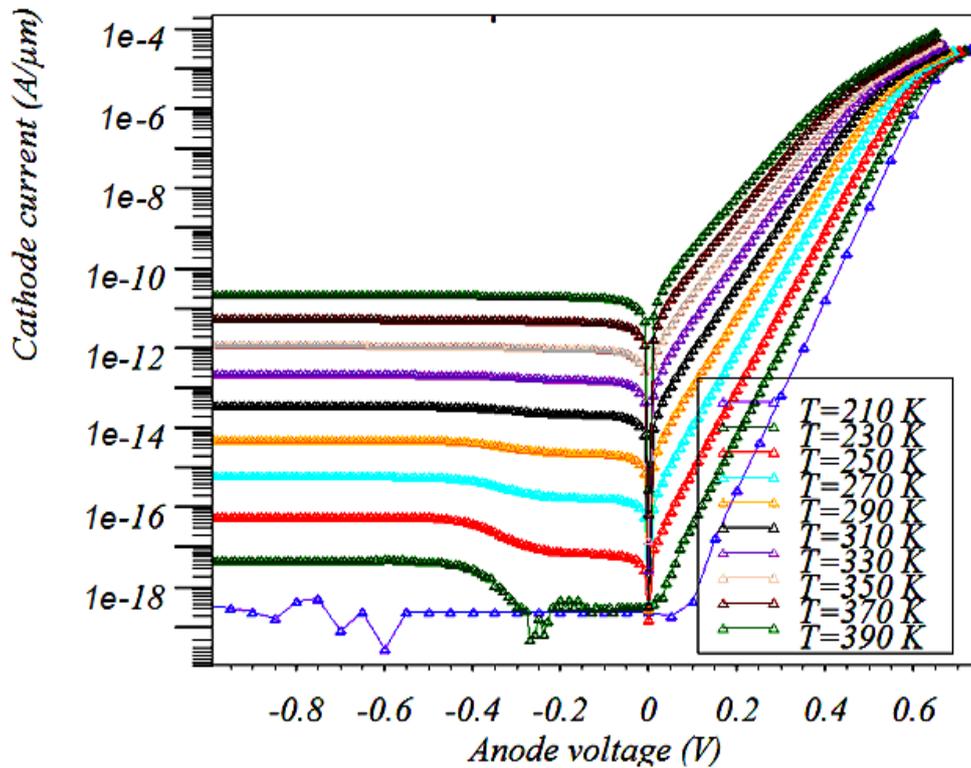


Figure 2.15. Évolution de la caractéristique courant-tension en fonction de la température pour T variant de 210 K à 390 K.

Les caractéristiques typiques en polarisation directe et inverse pour la structure Schottky Co/n-Si dans la gamme de température de 210K à 390K sont reportées comme graphe I - V représenté sur la figure 2.15. On peut aisément remarquer que le courant augmente nettement lorsque la température augmente tandis que la chute de tension directe diminue à travers le dispositif. La variation du courant directe, calculée à une polarisation de 0,5 V, est de quelques ordres de grandeur. À 210K la densité de courant atteinte $3.699 \times 10^{-09} \text{ A}/\mu\text{m}$, celle-ci évolue jusqu'à $9.823 \times 10^{-06} \text{ A}/\mu\text{m}$ à 390°C. Pour les tensions de polarisation directe plus élevée, la relation courant-température tend à saturer en raison de la limite tunnels et de la résistance série du dispositif.

En polarisation inverse, l'augmentation de la température se traduit par une augmentation de courant. La variation du courant inverse de saturation dépasse plusieurs ordres de grandeur mais diminue aussi avec l'augmentation de température. L'absence d'une isolation entre les contacts peut être à l'origine du courant de fuite élevé en inverse. L'emballement thermique en inverse peut produire un risque de destruction pour des tensions inverses très inférieures au claquage proprement dit.

Cette forte dépendance de la température de fonctionnement sur le courant est principalement liée au courant d'émission thermoionique, qui domine le courant tunnel à des températures plus élevées. Le courant total d'une jonction Schottky polarisée en inverse est donc donné par la somme des courants issus de l'effet tunnel et de l'effet

thermoélectronique [15]. A ces deux courants s'ajoutent des courants liés à la génération dans la ZCE de paires électrons - trous sous fort champ [16]. A faible champ ou en haute température, le courant thermoélectronique est majoritaire, et à fort champ, le courant tunnel devient majoritaire, et est indépendant de la température.

II.2.8. STRUCTURES AVEC PROTECTION PERIPHERIQUE

Les protections périphériques sont utilisées dans la conception des diodes de puissance pour augmenter la tenue en tension. Elles consistent à éviter le resserrement des équipotentielles en bordure de la jonction du composant, afin de diminuer l'amplitude du champ électrique qui apparaît à la périphérie. Il existe plusieurs techniques de protection, mais les plus couramment utilisées par les concepteurs de part leur simplicité de réalisation et leurs efficacités, sont les structures Mesa, JTE et les anneaux de garde, plaque de champ est le plus largement utilisé en raison de sa simplicité du processus et qu'il ne nécessite aucune implantation ionique et recuit à haute température. Par conséquent, la protection par plaque de champ est attrayant en lui-même ou elle peut être utilisée en combinaison avec d'autres techniques pour améliorer encore la tension de claquage [17]. Le dioxyde de silicium (SiO_2), est l'un des diélectriques couramment utilisés pour la réalisation de plaque de champ, mais souffre de champ électrique élevé et d'une avalanche prématurée en raison de son faible constant diélectrique.

II.2.8.1. PROTECTION PAR PLAQUE DE CHAMP SUR UN DIELECTRIQUE

Cette protection repose sur un effet électrostatique. Il s'agit de prolonger le contact du dispositif sur une couche d'oxyde. Le potentiel du contact via l'oxyde agira sur la répartition des charges en périphérie. La tenue en tension est surtout dépendante de la longueur de métallisation d'anode en regard avec la couche active, ainsi que de l'épaisseur d'isolant.

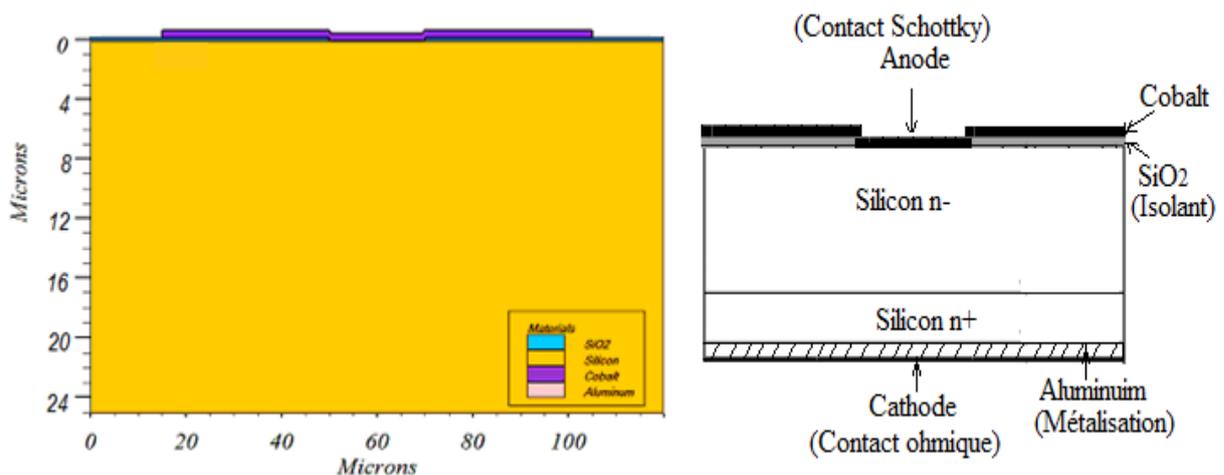


Figure.2.16 : Coupe d'une structure Schottky CO/Si-n avec protection par plaque de champ.

La Figure 2.16 présente la structure de dispositif simulé, elle est constitué d'une région faiblement dopée n - à une profondeur de $20\mu\text{m}$ pour une densité de dopants $N_D=5.0 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, tandis que celle de la région fortement dopé vaut $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et comporte une protection périphérique plaque de champ sur une couche de SiO_2 .

Les figure.2.17 (a) et (b) montrent le champ électrique près de l'interface silicium/oxyde/métal à $V_R = 80\text{volts}$ pour des structure sans et avec isolation respectivement. On peut voir sur ces figures que le champ maximal est maintenant réduite à $< 1.22 \times 10^5 \text{ V/cm}$, mais il est encore plus élevé. Le champ électrique peut être encore réduit en ajustant l'épaisseur d'oxyde.

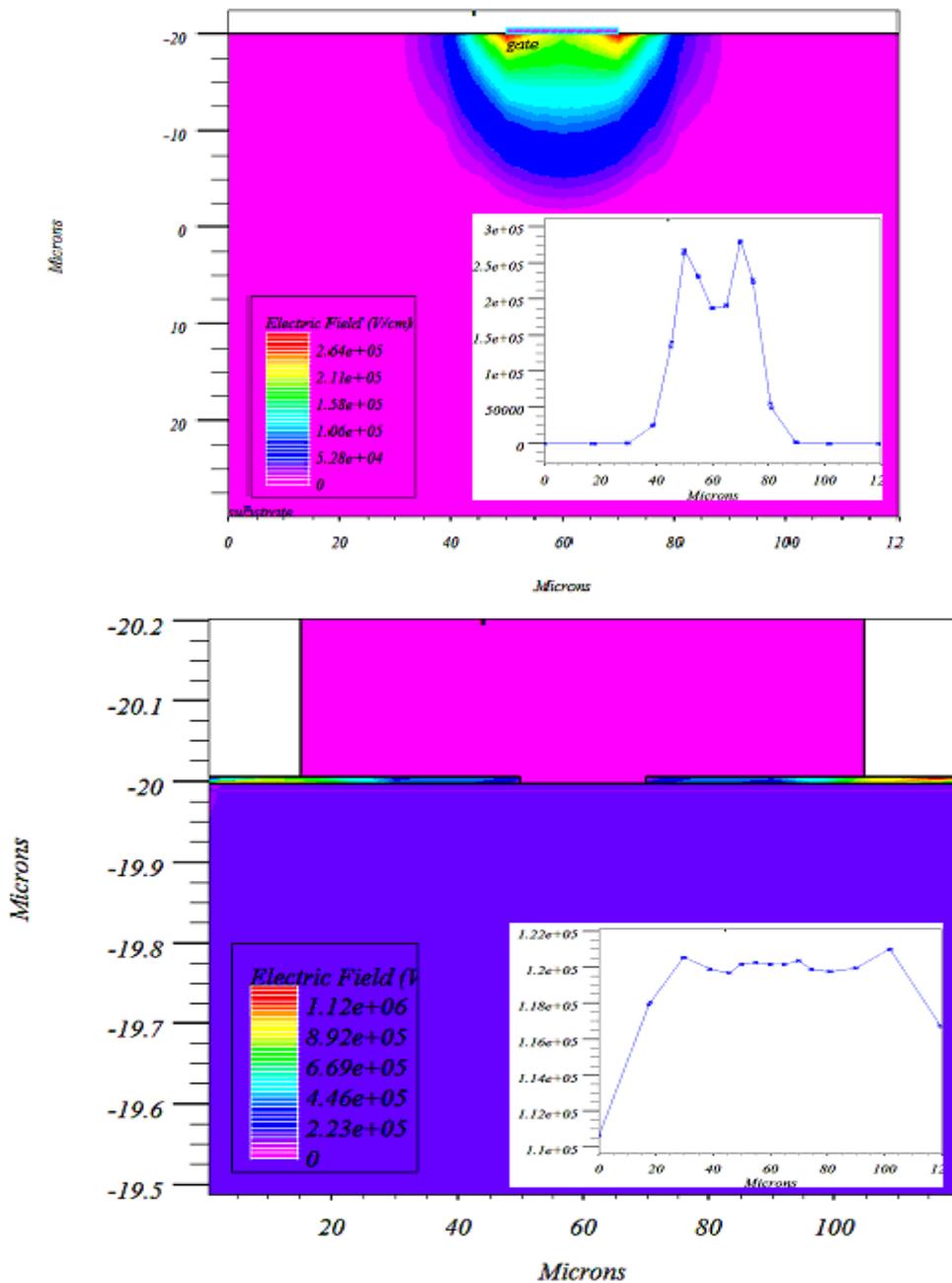


Figure.2.17 : champ électrique près de l'interface silicium/oxyde/métal pour $V_R = 80\text{volts}$ (a) sans isolation et (b) avec isolation.

II.2.8.1.1. effet de nature et d'épaisseur de la couche de diélectrique

La tension de claquage d'un redresseur Schottky dépend généralement du champ critique du semiconducteur, dopage de l'épicouche, épaisseur de la couche épitaxiale, et la protection périphérique utilisée au bord du dispositif.

La figure 2.18 montre la variation de la tension de claquage de la structure Schottky Si-n pour différentes épaisseurs de la couche d'oxyde. Les diodes Schottky avec protection par plaque de champ montrent une tension de claquage beaucoup plus élevée que pour les diodes sans protection. La tension de claquage d'une diode non isolée est 170V, contre 404,6V pour une diode avec un film d'oxyde d'épaisseur 46.47 nm. La valeur optimale de l'épaisseur d'oxyde t_{ox} est prévu pour être proche d'environ 615nm pour notre structure comme représenté sur la figure. Au dessous de cette valeur, l'avalanche diélectrique domine pour les diélectriques minces, le champ électrique maximum dans le diélectrique E_d , est beaucoup plus fort que celui dans le semiconducteur (E_s). Avec l'augmentation de l'épaisseur, E_d réduit et donc V_{BR} augmente.

Pour les couches d'oxyde très épais, la plaque de champ est loin du semi-conducteur et donc il n'a pas beaucoup d'influence sur la répartition du champ électrique. Dans ce cas, il n'y a également pas beaucoup d'amélioration pour la tension de claquage. Par conséquent, l'épaisseur optimale de l'oxyde de plaque de champ est celle qui sera suffisamment épaisse pour que le champ électrique maximum à l'intérieur de l'oxyde n'excède pas la résistance de claquage de l'oxyde, et sera suffisamment mince pour que la plaque de champ peut influencer la distribution de champ électrique à l'intérieur du semi-conducteur.

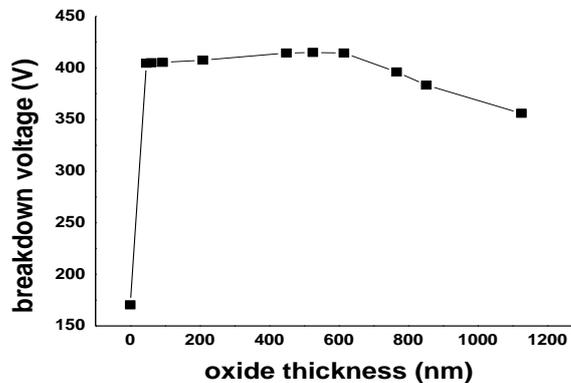


Figure. 2.18. Variation de la tension de claquage de la structure Schottky Si-n pour différentes épaisseurs de la couche d'oxyde.

La figure. 2.19 illustre l'influence de la protection par une couche d'oxyde sur les caractéristiques directe I-V de la diode Schottky simulé. Ces résultats sont dans le même modèle de celle donnée dans la littérature [18]. Il est évident, d'après cette figure que le courant dans la structure avec protection périphérique par plaque de champ est supérieur à celui d'une structure sans protection périphérique. Nous pouvons voir également que

l'augmentation de l'épaisseur d'oxyde à une valeur critique va diminuer le courant directe, mais après cette limite le courant sera presque insensible à cette épaisseur.

Les caractéristiques directes supérieures des diodes terminées par plaque de champ sont attribuées à la formation d'une couche d'accumulation de faible résistivité dans le semiconducteur. Dans des conditions de polarisation directe, les électrons dans la couche épitaxiale s'accumulent à l'interface semiconducteur-oxyde.

En fonction de la polarisation appliquée et de l'épaisseur d'oxyde, la concentration des porteurs majoritaires dans cette couche d'accumulation peut être deux à trois fois supérieure à la concentration de dopage. Puisque la couche d'accumulation de faible résistivité est en communication avec le bord de contact de Schottky, elle agit comme un contact virtuel qui augmente le courant efficace de conduction.

L'avalanche du dispositif peut être due à l'impact d'ionisation et au champ électrique maximum dans le diélectrique E_d quand il excède son champ critique de claquage. Pour les diélectriques SiO_2 et Si_3N_4 considérés dans notre simulation, les constants diélectriques et les champs critiques suivants sont assumés :

$$\text{SiO}_2, k = 3.9 \text{ et } E_c = 10 \text{ MV/cm}; \text{Si}_3\text{N}_4, k = 7.5 \text{ et } E_c = 9.2 \text{ MV/cm [19]}$$

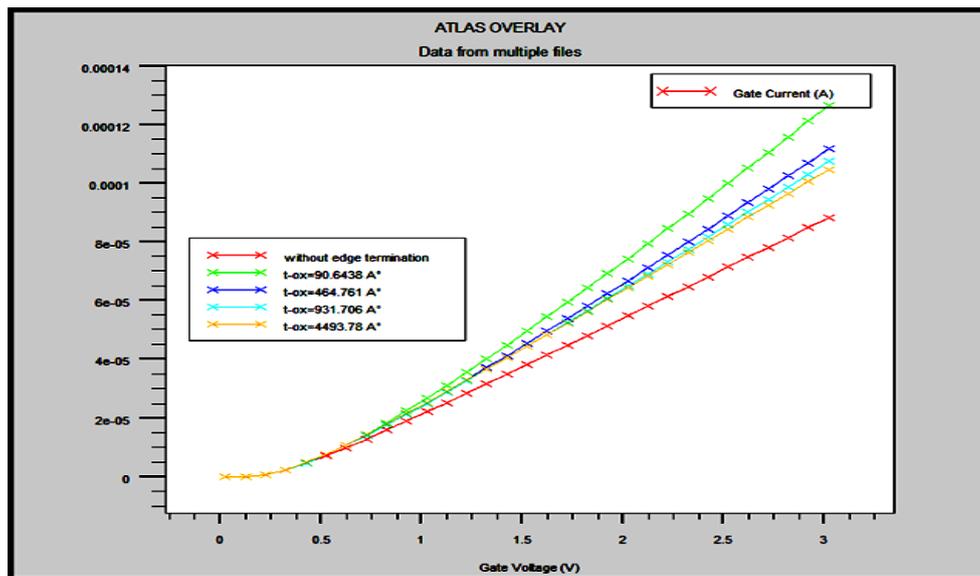


Figure. 2.19: Caractéristiques directe I-V de la diode Schottky simulée pour différentes épaisseurs de la couche d'oxyde.

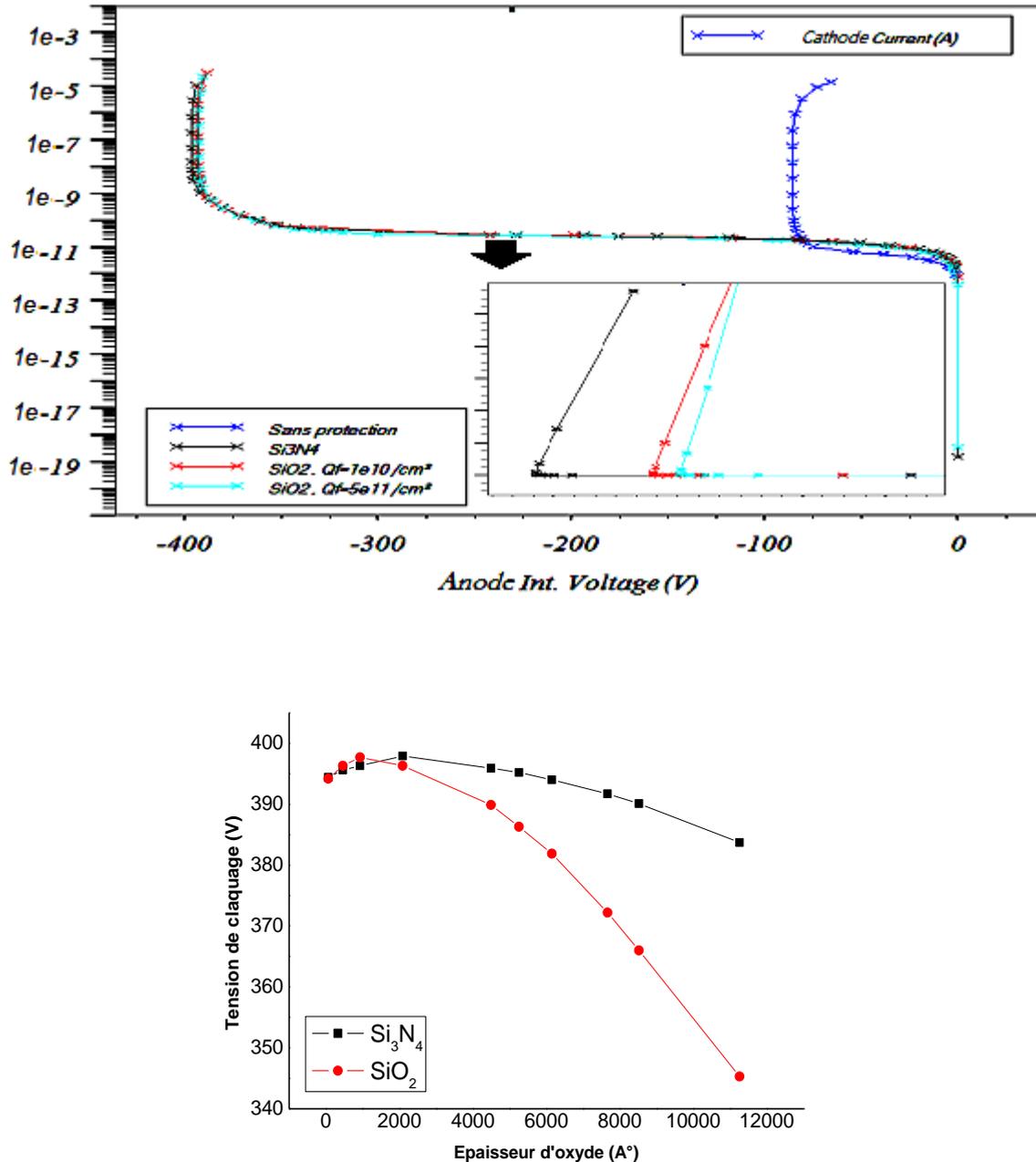


Figure.2.20. (a) Caractéristiques I-V inverse pour $d=931\text{\AA}$ et (b) Tension de claquage en fonction de l'épaisseur du diélectrique pour Si_3N_4 et SiO_2 .

Comme on peut voir sur la figure.2.20, la tenue en tension V_{BR} augmente avec l'augmentation du produit du constant diélectrique et la résistance du diélectrique au claquage, tandis que la valeur critique d'épaisseur d_c augmente avec la diminution de la résistance du diélectrique au claquage. Parmi les diélectriques, Si_3N_4 donne la meilleure tension de blocage principalement en raison de sa résistance plus élevée au claquage. Pour SiO_2 , V_{BR} se réduit pour une densité $Q_f = 5 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ des états d'interface, il varie de 393.6V pour $Q_f = 1 \times 10^{10} \text{cm}^{-2}$ à 392.9V pour $Q_f = 5 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$.

Sur la figure.2.21, on peut voir que le gradient des champs électriques maximum E_s , et E_d , diminue avec l'augmentation de la constante diélectrique. Cela implique que la courbe V_{BR} par rapport à d sera plus plate pour les diélectriques ayant des constants plus élevés, comme il est confirmé par la figure.2.20. Cette réduction de dépendance de la tension de claquage à l'épaisseur du diélectrique est un avantage important de l'utilisation de diélectriques de constant élevé.

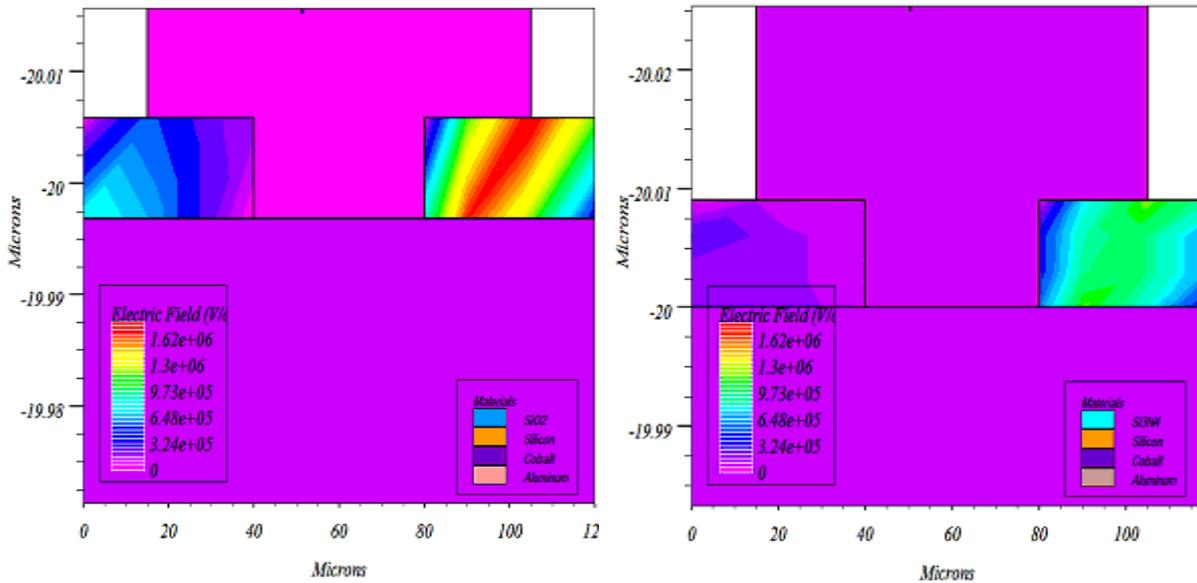


Figure.2.21: Profil de champ électrique à $V_R = 300$ volts pour SiO_2 et Si_3N_4 .

II.2.8.1.2. Effet de l'épaisseur et du dopage de la couche épitaxiale

Le choix du dopage de la couche épitaxiale est fait en considérant les graphes sur la figure. 2.22, qui montre la tension de claquage 1D maximum du dispositif en fonction de travail de sortie de métal et de concentration du dopage de la couche épitaxiale. Il est évident que lorsque la concentration du dopage dépasse $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, alors la tenue en tension diminue très rapidement.

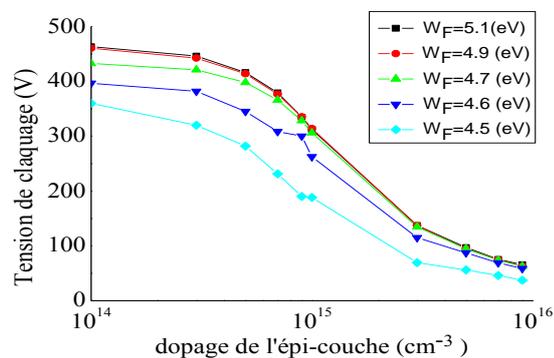


Figure. 2.22: Tension de claquage en fonction du dopage de l'épi-couche pour différents fonction de travail du métal.

La figure. 2.23 montre que l'intégration du champ électrique augmente rapidement en fonction du dopage de n^- depuis le dopage de $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. En effet, la tenue en tension réelle est plus petite que la valeur idéale. On peut voir également sur la figure. 2.22, que l'augmentation de la fonction de travail de l'anode à 4,9 eV, conduit à une augmentation de la tension de claquage, mais après cette valeur, la fonction de travail ne montre pas d'influence significative sur la tenue en tension.

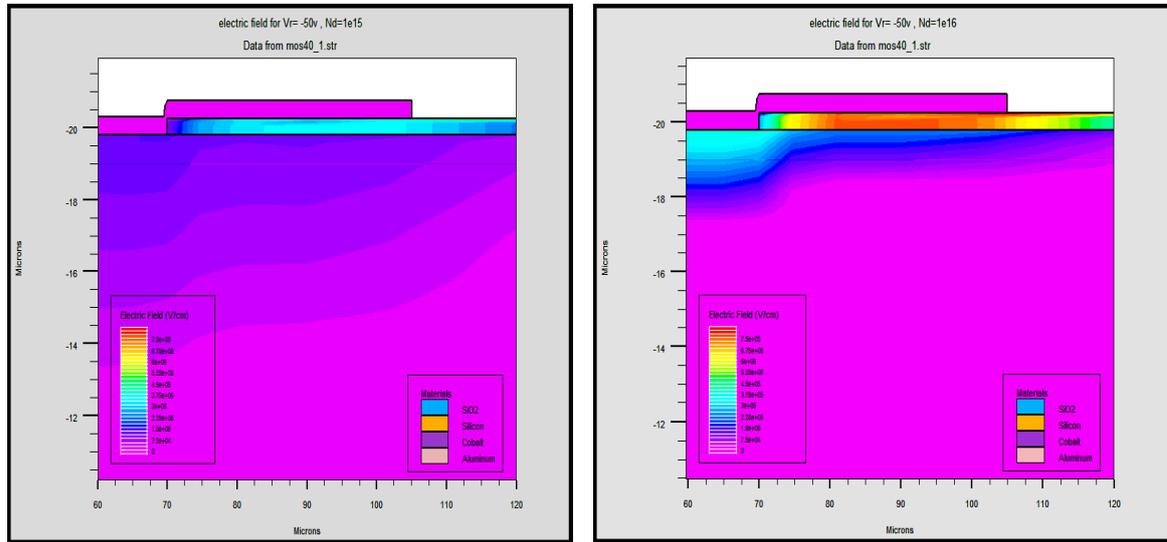


Figure. 2.23: Simulation du profil de champ électrique à $V_R = 50$ volts pour (a) $N_d = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ et (b) $N_d = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

La figure.2.24 montre comment la tension de claquage varie en fonction de l'épaisseur de la couche épitaxiale.

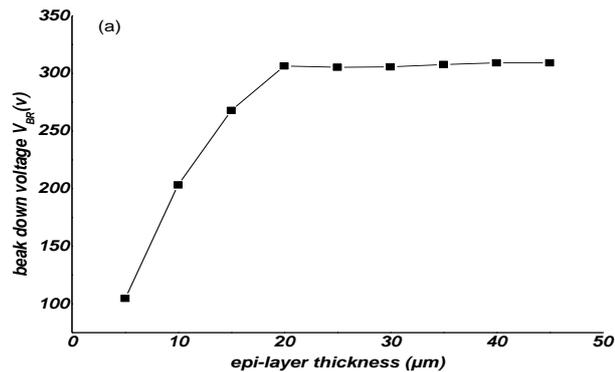


Figure.2.24 : Effet de l'épaisseur d'epi-couche sur la tension claquage de la diode Schottky simulée.

Il est clair que l'augmentation de l'épaisseur de cette couche jusqu'à une certaine limite (20 μm pour notre structure) va augmenter la tension de claquage jusqu'à ce que l'épaisseur soit approximativement égale à la largeur de la zone de déplétion en cas

d'avalanche. Au-delà de cette limite, la tension de claquage est pratiquement indépendante de cette épaisseur.

Figure.2.25 montre les caractéristiques I - V simulées en polarisation directe. On peut voir que la diminution de l'épaisseur de la couche épitaxiale de $35\mu\text{m}$ à $10\mu\text{m}$ conduit à une augmentation du courant direct de $7,874 \times 10^{-5} \text{A}/\mu\text{m}$ à $2,89 \times 10^{-4} \text{A}/\mu\text{m}$ pour $V=3\text{volts}$ sans variation en potentiel de diffusion.

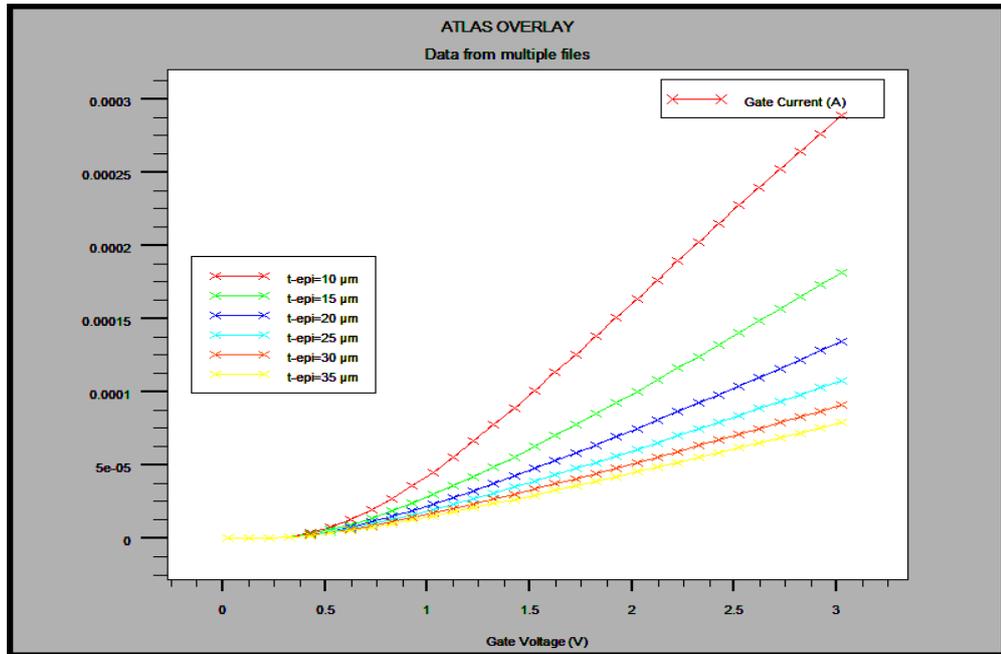


Figure.2.25: Caractéristiques directe I - V simulées de la diode Schottky avec l'oxyde de protection pour différentes épaisseurs d'epi-couche.

II.2.8.1.3. Effet de température

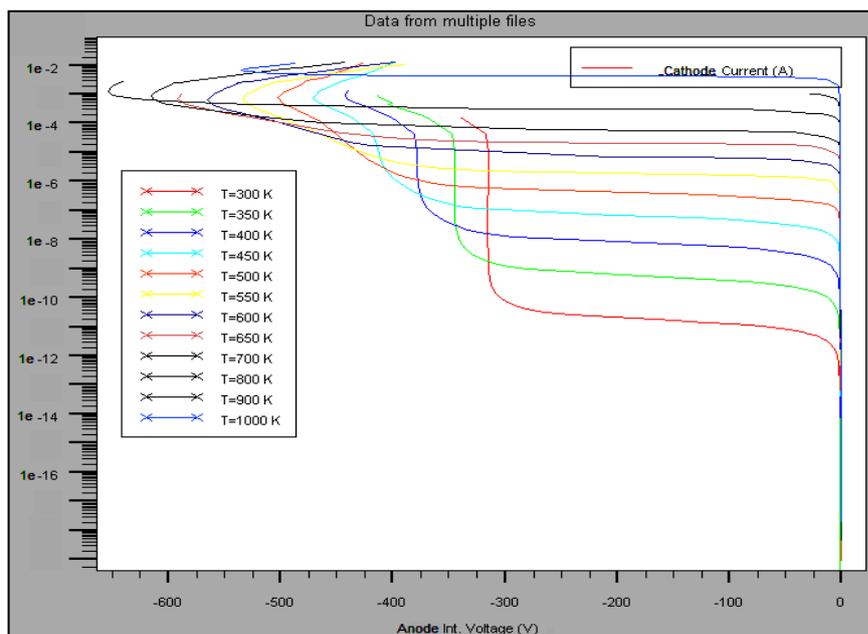


Figure.2.26 : Variation de la tension de claquage avec la température.

Sur la figure. 2.26, nous avons caractérisé notre structure pour des températures allant de la température ambiante jusqu'à 1000 K. Nous pouvons voir dans cette figure que, avec une variation de la température de 300 à 800 K, on observe une augmentation de la valeur de claquage de 315 V to 644 V et puis, il y a eu une diminution de la valeur de claquage avec une augmentation des fuites dans le dispositif.

Comme nous montons à 300 K, il y a eu une augmentation de la tension de claquage en raison de la dispersion des porteurs de charge avec l'interaction pour accueillir des phonons d'atomes, ce qui entraîne une diminution dans leur libre parcours moyen, et donc les porteurs de charge ne sont pas capables de gagner une énergie suffisante pour induire l'avalanche à ce stade. Pour induire une avalanche dans le dispositif, ils doivent acquérir plus d'énergie de champ appliqué et donc la tension de claquage va augmenter. La formule générale de l'abaissement du libre parcours moyen avec l'augmentation de la température est donnée comme [20]:

$$\lambda = \lambda_0 \tanh \left[\frac{E_p}{2KT} \right] \quad (\text{II.6})$$

Nous pouvons voir dans l'équation (II.6) qu'il existe une relation inverse entre la température et le libre parcours moyen en raison de laquelle le libre parcours moyen diminue avec l'élévation de la température c.à-d jusqu'à 800 K. Avec l'augmentation de la température à une certaine limite (au-dessus de 800 K), le phénomène de rétrécissement de la bande interdite (band gap narrowing phenomena) devient plus important. Grâce à ce phénomène, plus de porteurs peuvent passer facilement par effet tunnel à travers la bande, puisque moins d'énergie est nécessaire pour traverser la bande ici et donc, il y aura une diminution de la tension de claquage à des températures élevées.

II.2.8.2. STRUCTURE AVEC ANNEAU DE GARDE

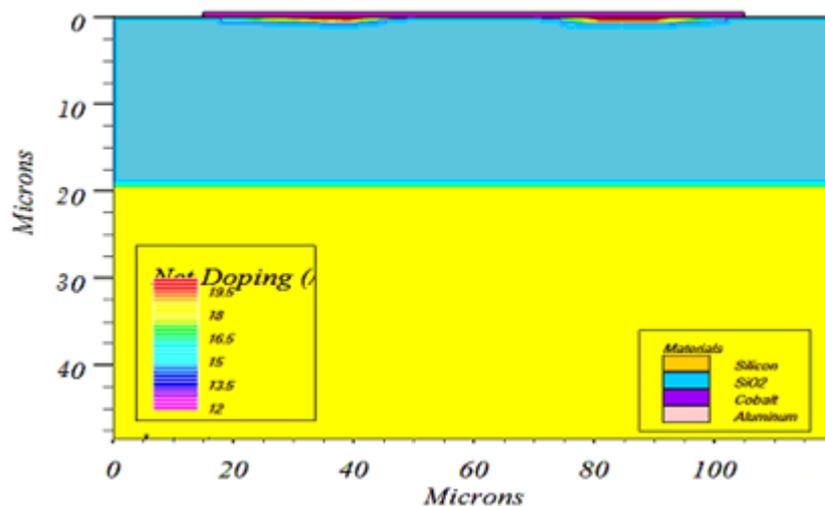


Figure.2.27 : Schéma en coupe de la structure de la diode avec présence de l'anneau de garde.

L'anneau de garde est un élément indispensable dans la diode Schottky. En effet, il permet de repousser les lignes de champ au-delà de la zone de terminaison du contact métallique, zone où le champ électrique est le plus fort.

Ces anneaux de garde sont obtenus par implantation de dopants de type p dans un matériau de type n et par activation et diffusion thermique de ces dopants. La nouvelle structure avec la présence de l'anneau de garde est donnée dans la figure.2.27. le profil d'implantation est effectué avec une énergie de 50keV pour une dose de $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$.

Des caractéristiques issues de la simulation de ces diodes ont été reportées dans la figure.2.28 et comparées au meilleur cas obtenu sans anneau de garde.

Sur la Figure.2.28, on observe immédiatement que la présence de l'anneau de garde permet d'augmenter la tenue en tension dans la structure de 390.3V à 405.5V en raison de la réduction de gradient de champ électrique au bord du dispositif (figure.2.29).

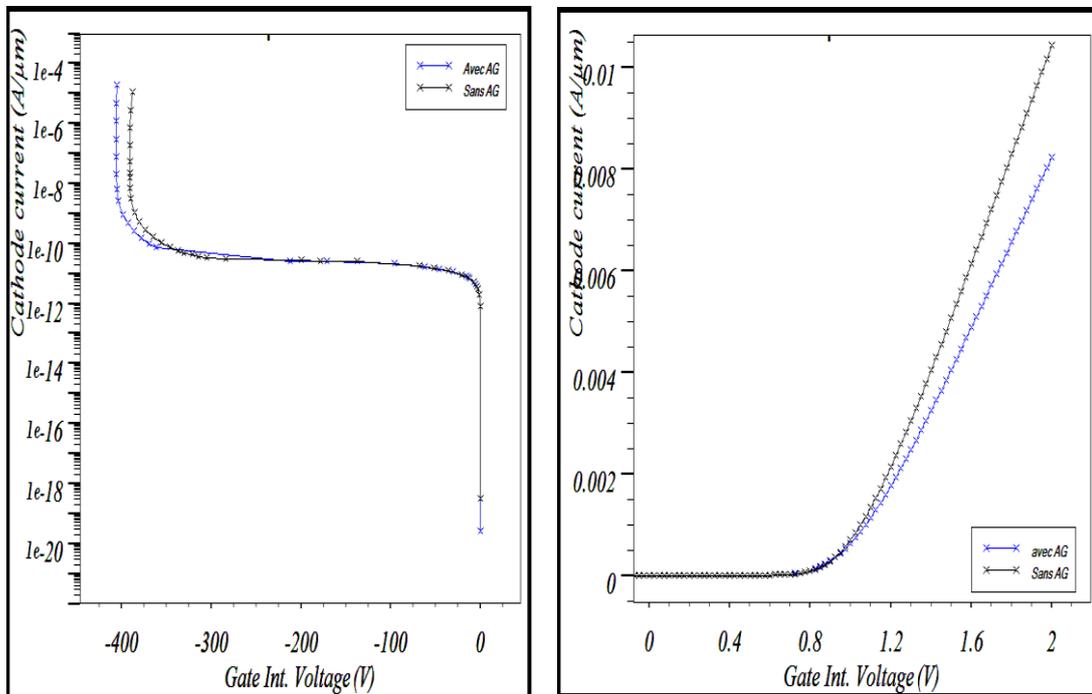


Figure. 2.28: Caractéristiques I-V de la diode Schottky avec et sans anneau de garde, en polarisation inverse à gauche et en polarisation directe à droite.

En direct, on observe une légère différence (décalage en tension) entre les caractéristiques. Le courant à 2V diminue de $1.042 \times 10^{-2} \text{ A}/\mu\text{m}$ en absence de l'anneau de garde à $8.226 \times 10^{-3} \text{ A}/\mu\text{m}$ en présence d'anneau.

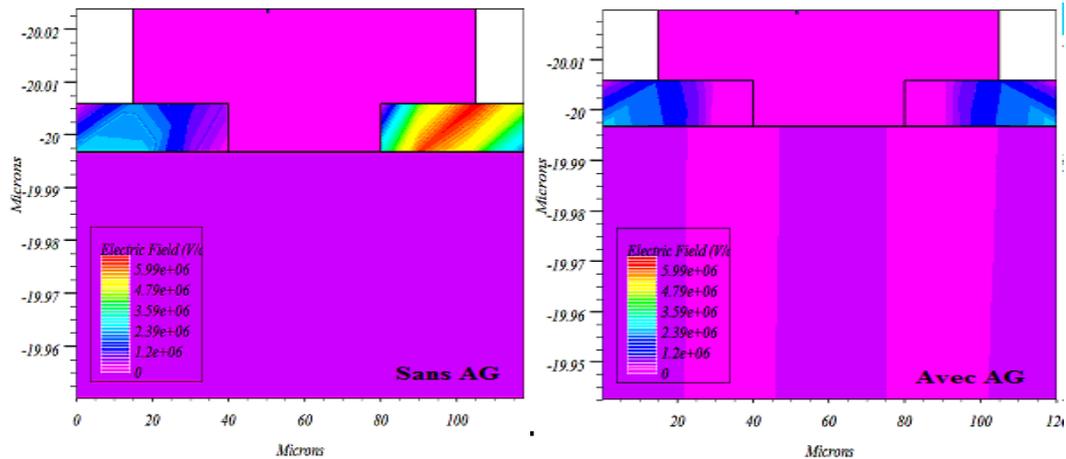


Figure.2.29: Profil de champ électrique avec et sans anneau de garde.

CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons discuté les résultats de simulation concernant les différentes propriétés d'une diode Schottky:

- ✓ Le champ électrique s'annule totalement au cœur de la zone n- ce qui indique que la zone de charge d'espace à cette jonction est de largeur faible et ceci du fait que le dopage des zones n- et n+ sont de même nature. En l'absence de polarisation, seulement la ZCE au contact métal /n- est à considérer. En polarisation directe, le champ électrique dans la diode reste faible même dans le cas d'une forte densité de courant. La zone faiblement dopée où la densité de porteurs est limitée est celle où le champ électrique est le plus important. Par contraire, le champ électrique au niveau de la jonction n-/n+ est plus faible en polarisation inverse que en polarisation directe.
- ✓ Le courant dans les structures Schottky est dû essentiellement aux porteurs majoritaires, le phénomène d'abaissement de barrière est négligeable en polarisation directe essentiellement pour les basses tensions positive car le champ électrique y est faible, en revanche il est bien visible en forte polarisation inverse. Le fort champ en polarisation inverse conduit à des fuites par effet Schottky, les courants inverses sont supérieurs à ceux attendait par la théorie d'émission.
- ✓ Pour des champs élevés, il faut tenir compte de l'effet tunnel qui peut apparaître dans la jonction. En polarisation directe l'effet tunnel est négligeable quelque soit la concentration du dopage, tandis qu'en polarisation inverse, La diode simulée présente un courant tunnel important devant le courant thermoélectronique.
- ✓ En polarisation directe, le courant diminue avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche épitaxiale pour une densité constante de dopage. Ce comportement est dû essentiellement à l'augmentation de la résistance série. En polarisation inverse, la variation de l'épaisseur de cette couche à une concentration constante de dopage engendre une augmentation de la tension de claquage dû à l'élargissement de la zone de déplétion et l'étalement des lignes du champ électrique mais à partir de 2 μ m.

- ✓ Le courant augmente avec l'augmentation de la température tandis que la chute de tension directe diminue à travers le dispositif. Pour les tensions de polarisation directe plus élevée, la relation courant-température tend à saturer en raison de la limite tunnels et de la résistance série du dispositif. En polarisation inverse, l'augmentation de la température se traduit par une augmentation de courant. La variation du courant inverse de saturation dépasse plusieurs ordres de grandeur mais diminue aussi avec l'augmentation de température. L'absence d'une isolation entre les contacts peut être à l'origine du courant de fuite élevé en inverse.

Concernant la protection périphérique, nous avons montré que:

- ✓ La protection périphérique par plaque de champ peut augmenter significativement la tension de claquage (de 170V pour une diode non isolé à 404.6V pour une diode avec un film d'oxyde d'épaisseur 46.47 nm). Au dessous de cette valeur optimale d'épaisseur d'oxyde, l'avalanche diélectrique domine pour les diélectriques minces. Pour les couches d'oxyde très épais, la plaque de champ est loin du semi-conducteur et donc il n'a pas beaucoup d'influence sur la répartition du champ électrique. Les caractéristiques directes supérieures des diodes protégées par plaque de champ sont attribuées à la formation d'une couche d'accumulation de faible résistivité dans le semiconducteur.
- ✓ La tension V_{BR} augmente avec l'augmentation du produit du constant diélectrique et la résistance du diélectrique au claquage, aussi nous avons vus que parmi les diélectriques, Si_3N_4 donne la meilleure tension de blocage principalement en raison de sa résistance plus élevée au claquage.
- ✓ lorsque la concentration du dopage de la couche épitaxiale dépasse $5 \times 10^{14} cm^{-3}$, la tension V_{BR} diminue très rapidement, tandis que l'augmentation de l'épaisseur de cette couche jusqu'à une certaine limite (20 μm pour notre structure) va augmenter la tension de claquage.

CHAPITRE III: CELLULES PHOTOVOLTAÏQUES

INTRODUCTION

En raison du développement de l'industrie, du transport et des moyens de communication, une croissance de la consommation mondiale d'électricité a été observée pendant les dernières décennies. Cependant, la plupart de l'énergie électrique est produite par combustion et ressources non renouvelables. De plus ce type de production d'énergie est très polluant. Le développement des sources d'énergies renouvelables et non polluantes est donc d'actualité. Parmi les sources d'énergies renouvelables, on compte le vent, les flux marins et océaniques, la géothermie, le solaire PV, etc... Ce dernier est une source d'énergie très puissante. L'électricité photovoltaïque est obtenue par la transformation directe de la lumière du soleil en électricité, au moyen de cellules photovoltaïques (Annexe C). En pratique, la conversion d'énergie lumineuse en énergie électrique n'est pas totale. Différentes pertes viennent influencer le rendement d'une cellule. Elles sont dans la plupart des cas dues à la nature du matériau et à la technologie utilisée. Ces pertes sont évoquées ci-après:

La première limitation correspond aux photons utiles dans la conversion. Tous les photons possédant une longueur d'onde inférieure à celle associée au gap du semiconducteur ne peuvent générer de paire électron/trou, et sont donc perdus.

Les photons d'énergie supérieure au gap ne pourront générer qu'une seule paire électron/trou. L'excès d'énergie est perdu pour la conversion et thermalisé. Sous un éclairage de AM1.5, cette perte est évaluée à 33% dans le cas du silicium [21].

La tension maximale aux bornes de la cellule (V_{OC}) ne pourra pas dépasser 0.65 V pour le silicium, sauf dans le cas de cellules très minces. Le facteur de forme FF, même dans le cas d'une cellule idéale, ne peut dépasser 0.89, ce paramètre dépend de la conception de la cellule, de la qualité de la jonction et du matériau, de la résistivité des contacts métalliques, etc...

Le rendement d'une cellule dépend aussi à la base du nombre de photons y pénétrant. Cette quantité est limitée par le coefficient de réflexion R de la surface de la cellule, qui pondère toutes les équations des courants photo-générés par un coefficient (1-R). Afin de diminuer les réflexions, la surface de la cellule est texturée et recouverte d'une couche antireflet. De manière analogue, le taux d'ombrage tient compte de la couverture partielle de la surface de la cellule par une partie opaque correspondant à la surface des contacts métalliques de la face avant. Par contre. Pour certaines de cellules, le taux d'ombrage est égal à zéro. Il y a une partie des photons qui, bien qu'ayant l'énergie nécessaire, traversant l'épaisseur de la cellule sans être absorbés. Ce terme devient important quand la cellule est très fine ($<100\mu\text{m}$), et peut être minimisé en utilisant une couche réfléchissante sur la face arrière de la cellule.

Le rendement de collecte correspond au rapport entre le nombre de porteurs de charge effectivement collectés et le nombre total photogénérés. Ce terme tient donc compte des recombinaisons de porteurs survenant dans le volume et en surface de la cellule, et il dépend directement de la durée de vie des porteurs minoritaires. Dans ce chapitre nous allons présenter les techniques principales permettant de piéger la lumière tels que la texturation, plasmon de surface, et l'utilisation des couches antireflets.

III.1. APPROCHES DE PIEGEAGE DE LA LUMIERE DANS LES CELLULES PHOTOVOLTAÏQUES

Le piégeage de la lumière, où la surface de la cellule est structurée où texturée pour confiner la lumière au sein du semiconducteur, permet une absorption selon plusieurs passes. Ceci permet aussi de réduire la quantité de matériau, puisque l'absorption totale ne se produit pas dans un seul passage. Le piégeage de la lumière est très important dans de nombreuses cellules solaires commerciales: la surface des cellules $c-Si$ inclue souvent des texturations pyramidales pour réfléchir la lumière à partir de surfaces vers la couche $c-Si$, aussi les cellules solaires $a-Si:H$ utilisent des textures aléatoires pour augmenter l'absorption de la lumière. Les conceptions de piégeage de la lumière pour des films mince et épais sont très différentes: pour films épais, le piégeage de la lumière peut être décrit en utilisant les techniques d'optique de rayonnements, tandis que les films minces nécessitent un traitement avec les techniques d'optique ondulatoire.

III.1.1. COUCHE ANTIREFLET

La lumière incidente sur une cellule solaire peut optiquement être reflété, absorbé ou transmis. La couche antireflet (CAR) a le rôle principale de minimiser la réflexion à partir de la surface supérieure, mais la plupart des CAR sont simultanément des contacts supérieur et doit donc être suffisamment conducteur pour diminuer les pertes ohmiques (perte de puissance). Bien que, les dispositifs récents font incorporer des barres et des doigts métalliques pour diminuer ces pertes, leur conception est important pour minimiser la réflexion et l'effet d'ombre de ces lignes métalliques [22, 23, 24].

CAR est généralement constitué d'une couche diélectrique mince, dans le cas des cellules en couches minces, il est généralement un oxyde conducteur transparent (OTC), tels que l'oxyde d'indium-étain (ITO), l'oxyde de zinc (ZnO) et le dioxyde d'étain (SnO_2). Dans un cas très simple, pour réduire la réflexion, le principe d'action de ces couches est basé sur l'interférence des faisceaux lumineux dans les couches diélectriques minces. Si l'épaisseur de la couche diélectrique est égale à:

$$d_{CAR} = \frac{(2N+d)\lambda}{4n_{CAR}}, \quad N = 0,1,2,3, \dots \quad (III.10)$$

On obtiendra l'annulation des faisceaux réfléchis à l'interface air/CAR et CAR/semiconducteur. Pour $c-Si$, l'utilisation de deux couches antireflet est plus favorable pour avoir moins de réflexion, mais la plupart des cellules en couche mince utilise une seule couche antireflet pour maintenir un faible coût de fabrication. L'utilisation

d'une seule couche d'OTC est optimisée pour une seule longueur d'onde et pas pour le spectre solaire entier, ce qui entraîne aux pertes dans les autres secteurs du spectre.

III.1.2. TEXTURATION DE LA SURFACE

La texturation du silicium est utilisée pour diminuer la réflectivité de la surface de la cellule [25,26,27,28]. Cette opération vise à développer en surface un relief micrométrique, généralement de forme pyramidale. La longueur d'onde de la lumière incidente étant inférieure aux dimensions des structures ainsi réalisées, les rayons incidents suivent les lois de l'optique géométrique.

L'insertion sur la figure.3.5 présente le principe de réflexions multiples propre à la texturation. Le relief de la surface entraîne une baisse de la réflexion en face avant: un rayon arrivant à incidence normale (par rapport au plan de la cellule) sur une pyramide sera réfléchi sur la face d'une pyramide adjacente, cette double réflexion sur les pyramides diminue le coefficient de réflexion totale, qui ne vaut plus R mais R^2 . D'autre part, un rayon d'incidence normale sera transmis dans la cellule avec un angle de réfraction θ différent de 0° . Le trajet de ce rayon au sein du silicium sera donc augmenté d'un facteur $1/\sin \theta$ par rapport au cas d'une surface plane et perpendiculaire à l'éclairement, ce qui aura pour effet d'augmenter la part de photons absorbés par le matériau. Pour finir, la texturation de la surface entraîne un piégeage plus important de la lumière pénétrant dans la cellule. Sur la face arrière de la cellule, il existe un angle d'incidence critique θ_c à partir duquel le rayon est totalement réfléchi et prolonge son trajet au sein du semiconducteur, augmentant là aussi l'absorption des photons. En appliquant la loi de Descartes, on trouve que cet angle vaut 17° dans le cas du silicium dans l'air. Ce phénomène est particulièrement important dans le cas des cellules de faible épaisseur, et peut être renforcé par une texturation de la face arrière et/ou une couche antireflet sur cette même face.

Différents procédés sont utilisés pour texturer la surface du silicium: attaques chimiques de la surface (KOH, NaOH, acides [21], texturation mécanique [25] (laminage à froid sous un peigne dentelé), texturation laser [21].

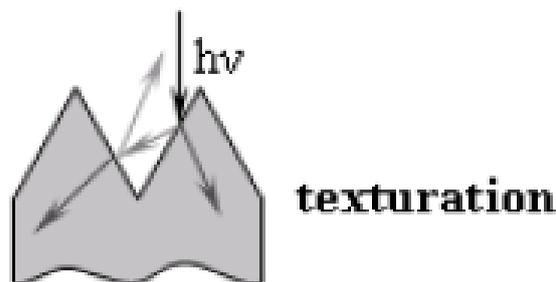


Figure.3.5 Principe de réflexions multiples propre à la texturation.

III.1.3. COUCHES MINCES ET EFFET DE PLASMON DE SURFACE

Les cellules solaires [29,30,31], qui peuvent fournir d'énergie renouvelable et propre en convertissant la lumière du soleil en énergie électrique, ont attiré beaucoup d'attention durant ces dernières années. Malgré l'importance croissante, nous avons besoin de réduire le coût de ces cellules et augmenter l'efficacité de conversion d'énergie pour qu'ils puissent réussir à remplacer les carburants fossiles pour la production d'énergie électrique.

Actuellement, les cellules solaires en couches minces sont considérées comme des alternatives principales et peu coûteuses aux cellules conventionnelles à base de plaquettes. Avec l'épaisseur de quelques microns et ci-dessous, elles peuvent de manière significative diminuer la quantité du matériel semi-conducteur exigé, et ainsi, réduire les coûts de production de telles cellules [32,33]. De plus, les libres parcours de diffusion de porteurs sont beaucoup plus courts dans les couches minces, ce qui conduit à une réduction des pertes due à la recombinaison des porteurs minoritaires. Cependant, en raison de l'absorption relativement faible de la lumière par ces matériaux, des mécanismes plus efficaces de piégeage de lumière sont nécessaires pour une meilleure performance par rapport aux cellules solaires à base de plaquette. Les méthodes habituelles telles que la texturation de surface utilisée pour les cellules à base de plaquette [34,35] ne peuvent pas être appliquées pour les cellules en couche mince : la texturation des surfaces de l'ordre de micron a relativement une large espace, tandis que la texturisation des surfaces submicronique augmente inévitablement la surface et donc la recombinaison des porteurs minoritaires sur la surface. Une manière prometteuse trouvée récemment [36] consiste à utiliser le champ rapidement émergent de plasmonique, pour améliorer l'absorption optique de la couche photo active. Les études expérimentales récentes sur les cellules solaires organiques [37,38] et inorganiques [39,40] ont montré que la performance des cellules en couche mince peut être améliorée de manière significative par la déposition des nanoparticules métalliques sur la couche photo-active. Il a été prouvé que la performance accrue de ces cellules est attribuée à l'amélioration de l'absorption optique des couches minces photo-actives [41]. Cette absorption plus efficace est provoquée par la diffusion de ces nanoparticules [42], ce qui augmente fortement le piégeage de la lumière à l'intérieur de cellules par le couplage avec les modes guidant d'ondes dans la couche active. Par le couplage avec les plasmons de surface, qui sont des modes propres de métaux [43], la lumière incidente interagit de manière très efficace avec les nanoparticules métalliques sur des sections beaucoup plus grandes que les sections transversales de ces nanoparticules [44].

En d'autres termes, l'excitation de plasmons de surface multiples conduit à une diffusion extraordinaire [45] et une forte amélioration du champ électromagnétique au voisinage de surfaces de nanoparticules [46,47]. En raison de l'amélioration des champs proches, la lumière diffusée peut très efficacement coupler avec les modes guidés d'ondes dans la couche active [48,49], augmentant considérablement le trajet optique et l'absorption de la lumière à l'intérieur de cette couche [50]. Un avantage supplémentaire de nanoparticules métalliques est dans la nature résonante de l'amélioration plasmonique. Cela rend les nanoparticules comme un outil très efficace et flexible pour les cellules solaires,

qui peuvent être utilisées pour manipuler le piégeage de la lumière et l'efficacité énergétique de la conversion. En ajustant les fréquences de résonance (en changeant le matériau, taille ou arrangement des nanoparticules), on peut modifier les profils spectraux de la puissance absorbée dans la couche photo-active, ainsi que la puissance totale absorbée. Cependant, malgré les plusieurs tentatives expérimentales effectuées pour améliorer la performance des cellules solaires en utilisant des nanoparticules de différents matériaux, tailles et formes, aucune étude systématique jusqu'ici a été réalisée sur le piégeage optimum de la lumière par l'ajustement approprié des paramètres de nanoparticules.

Beaucoup d'efforts ont été fait pour étudier l'influence de la forme de nanoparticules [50,51] sur l'amélioration du champ localisé et le piégeage de la lumière. Cependant, des questions aussi importantes sur les plasmons de surface et le rôle des modes d'ordre supérieur dans l'amélioration plasmoniques restent encore ouverte. Ainsi, trouver l'espace des paramètres optimaux de nanoparticules en réglant les modes d'ordre supérieur reste l'un des défis majeurs dans ce sens.

III.2. PLASMONS DE SURFACE

Les plasmons de surface ont été originalement découverts par *R.W. Wood* en 1902. Lors de son observation du spectre de réflectivité spéculaire des réseaux de diffraction, il remarqua des anomalies sous forme des fines bandes sombres dans le spectre diffracté [52]. Impossible à interpréter avec la théorie dite scalaire de la diffraction de la lumière, il faudra alors attendre le début des années 1940 et le développement de la théorie vectorielle, avec les travaux de *U. Fano* pour trouver une interprétation théorique de ces anomalies, basée sur l'existence des ondes de surface (plasmon de surface) supportées par le réseau [53].

En 1965, *A. Hessel* et *A. A. Oliner* proposent une théorie plus générale des anomalies de Wood pour les réseaux métalliques. Ils interprètent ces anomalies par des effets de résonance provenant du couplage entre l'onde incidente et les modes propres du réseau [54]. Une amplification très importante du champ électromagnétique local est alors associée à cette résonance. S'appuyant sur cette idée, trois ans plus tard *A. Otto* (1968) met en évidence expérimentalement que les ondes de surface peuvent être excitées en utilisant la réflexion totale frustrée [55]. Dans la même année, *E. Kretschmann* et *H. Raether* obtiennent les mêmes résultats à partir d'une configuration différente, la méthode de réflexion totale atténuée [56].

Le traitement complet par les lois de l'électromagnétisme du mouvement coopératif des électrons libres dans un milieu métallique semi-infini (conditions de continuité à l'interface), permet de montrer l'existence de modes particuliers pouvant se propager le long de l'interface entre le métal et le vide (ou le milieu diélectrique). Ces modes électromagnétiques correspondant à des ondes de surface ont été nommés « plasmons de surface » (figure 3.6). Ces plasmons de surface présentent alors un large spectre de

fréquence propre dépendant de leur vecteur d'onde k (de 0 à $\omega_p/\sqrt{2}$ où ω_p est la fréquence plasma du métal massif).

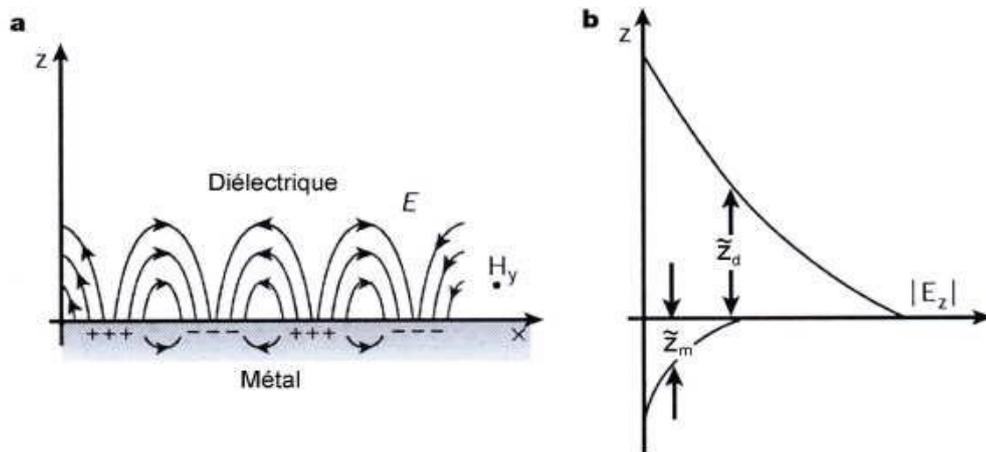


Figure. 3.6: (a) La propagation des oscillations du plasma d'électrons libres à la surface du métal. (b) la composante normale du champ électrique du plasmon de surface selon la direction z perpendiculaire à l'interface [57].

Il est connu que ces plasmons de surface peuvent être divisés en deux sous groupes, suivant leur distance de propagation : les plasmons de surface délocalisés ou étendus qui sont des plasmons de surface se propageant sur des surfaces métalliques planes et les plasmons de surface localisés [58] qui sont des excitations localisées du plasma d'électrons à l'intérieur de petites structures d'une taille de quelques dizaines de nanomètres, par exemple des nanoparticules métalliques ou des rugosités de surface de certaines structures.

Lorsque la taille de ces nanoparticules est petite devant la longueur d'onde, les propriétés optiques des nanoparticules métalliques sont dominées par l'oscillation collective des électrons de conduction (*plasmon de surface localisé*) induite par interaction avec un rayonnement électromagnétique. Le champ électrique du rayonnement incident induit la formation d'un dipôle dans la nanoparticule (voir Fig. 3.7). Une force de rappel s'oppose alors aux déplacements des électrons par rapport au centre de la particule (*confinement spatial*). Comme pour un oscillateur harmonique mécanique, l'oscillation des charges dans la nanoparticule est résonante pour une certaine fréquence d'excitation (*résonance plasmon*). Seuls les métaux possédant des électrons libres (essentiellement l'or, l'argent, le cuivre, et les métaux alcalins) possèdent des résonances plasmons dans le spectre visible, et présentent pour cette raison de telles couleurs intenses. La fréquence de résonance plasmon est déterminée par la force de rappel des électrons de conduction, laquelle dépend d'un grand nombre de paramètres tels que la composition, la taille et la forme des particules.

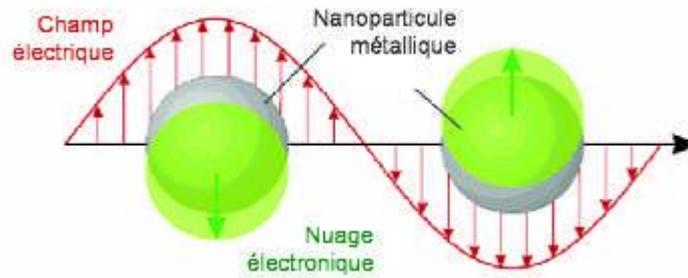


Fig. 3.7: Schéma illustrant l'action d'un champ électromagnétique sur le plasmon d'une nanoparticule métallique, montrant le déplacement du nuage électronique par rapport au centre de la nanoparticule [59].

III.2.1 PROPRIETES OPTIQUES DE NANOPARTICULES METALLIQUES ISOLEES:

III.2.1.1 LA THEORIE DE MIE

La solution générale du problème de diffraction d'une seule sphère de matière arbitraire dans le cadre de l'électrodynamique a été donnée par Mie en 1908. C'était la variation de couleur des solutions colloïdales d'or qui motivé Mie pour s'appliquer la théorie générale d'extinction de lumière à des petites particules. Il a appliqué les équations de Maxwell avec des conditions aux limites appropriées dans les coordonnées sphériques en utilisant des expansions multipolaires des champs électriques et magnétiques incidents et a offert un calcul électrodynamique exact de l'interaction de la lumière avec les nanoparticules métalliques sphériques. La principale hypothèse de la théorie de Mie est que la particule et son milieu environnant sont chacun homogène et descriptible par leurs fonctions diélectriques volumiques [60,61,62]. Les équations du Maxwell peuvent être réduites à résoudre les équations d'ondes pour le champ électrique E et magnétique H :

$$\begin{aligned}\nabla^2 E + k^2 E &= 0 \\ \nabla^2 H + k^2 H &= 0\end{aligned}\quad (\text{III.11})$$

$$\text{avec } k^2 = \varepsilon\mu\omega^2$$

où ε est la permittivité diélectrique et μ est perméabilité magnétique du milieu.

E et H sont reliés entre eux par :

$$\begin{aligned}\nabla \times E &= i\omega\mu H \\ \nabla \times H &= -i\omega\varepsilon E\end{aligned}\quad (\text{III.12})$$

$$\text{avec: } \nabla \cdot E = 0, \quad \nabla \cdot H = 0.$$

Si nous construisons une sphère de rayon R très grand et centrée sur la particule, l'énergie qui traverse la sphère par unité de temps s'exprime par :

$$w_a = - \int \nabla \cdot S(r) dr \quad (\text{III.13})$$

Où $S(r)$ est la valeur moyenne temporelle du vecteur de Poynting :

$$S(r) = \frac{1}{2} \mathcal{R} \{E(r) \times H^*(r)\} \quad (\text{III.14})$$

La conservation de l'énergie permet de d'écrire w_a sous la forme d'une somme :

$$w_a = w_0 - w_s + w_{ext} \quad (\text{III.15})$$

Les sections efficaces de diffusion σ_s , d'absorption σ_a et d'extinction σ_{ext} sont définies

Comme:

l'intensité de l'onde incidente I_0 . Les sections efficaces ont:

$$\sigma_a = \frac{w_a}{I_0}, \sigma_s = \frac{w_s}{I_0}, \sigma_{ext} = \frac{w_{ext}}{I_0} \quad (\text{III.16})$$

La solution générale de E et H permet de calculer les sections efficaces d'extinction et de diffusion, comme [63,64]:

$$\sigma_{ext} = \frac{2}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \mathcal{R}\{a_n + b_n\} \quad (\text{III.17})$$

$$\sigma_{diff} = \frac{2}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \left\{ |a_n|^2 + |b_n|^2 \right\} \quad (\text{III.18})$$

$$\sigma_{abs} = \sigma_{ext} - \sigma_{diff}$$

où x est le paramètre de taille sans dimensions:

$$x = kR = \frac{2\pi n_m R}{\lambda}, m = \sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_m}} \quad (\text{III.19})$$

Où R est le rayon de la particule, n_m est l'indice de réfraction du milieu extérieur, λ est la longueur d'onde de la lumière incidente dans le vide, et a_n et b_n sont des coefficients de diffusion et sont donnés par:

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{m \psi_n(mx) \psi_n'(x) - \psi_n(x) \psi_n'(mx)}{m \psi_n(mx) \xi_n'(x) - \xi_n(x) \psi_n'(mx)} \\ b_n &= \frac{\psi_n(mx) \psi_n'(x) - m \psi_n(x) \psi_n'(mx)}{\psi_n(mx) \xi_n'(x) - m \xi_n(x) \psi_n'(mx)} \end{aligned} \quad (\text{III.20})$$

ψ_n et ξ_n sont les fonctions de Ricatti-Bessel d'ordre n :

$$\psi_n(r) = rj_n(r)$$

$$\xi_n(r) = rh_n^2(r)$$

$$\text{Et } m = \sqrt{\varepsilon/\varepsilon_m}$$

Il est possible de montrer que les résultats obtenus dans l'approximation dipolaire sont tout à fait compatibles avec ceux de la théorie de Mie. En effet, un développement limité des équations précédentes en fonction de $x = kR \ll 1$ met en évidence que le terme d'ordre le plus bas est porté par le coefficient a_1 et que son ordre est $(kR)^3$. En se limitant à cet ordre, on retrouve les formules de l'approximation dipolaire et l'on constate, d'après les formules précédentes, que l'extinction (absorption) varie comme le volume et la diffusion comme le carré du volume de la particule dans cette approximation [63,64].

$$\sigma_{ext} = 9 \frac{\omega}{c} \varepsilon_m^{3/2} V \frac{\varepsilon_2(\omega)}{[\varepsilon_1(\omega) + 2\varepsilon_m]^2 + [\varepsilon_2(\omega)]^2} \quad (\text{III.21})$$

Où V est le volume de la particule sphérique, ω est la fréquence angulaire de la lumière d'excitation, c est la vitesse de la lumière, ε_m et $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$ sont les fonctions diélectriques du milieu environnant et de la matière elle-même, respectivement.

III.2.1.2. APPROXIMATION QUASI-STATIQUE

Pour les nanoparticules de dimension faible, le champ électrique de la lumière peut être considéré comme constante, et l'interaction est régie par l'électrostatique plutôt que l'électrodynamique. L'interaction du champ E avec une nanoparticule satisfaisant la condition de $x \ll 1$ peut donc être traitée en considérant le champ appliqué comme statique.

Dans le cadre de l'approximation quasistatique (ou dipolaire), le champ appliqué crée une distribution de charges accumulées à l'interface nanoparticule/matrice. Cette distribution est assimilée à un petit dipôle unique p (Fig.3.8). Le champ E_{int} et la polarisabilité de la nanoparticule s'écrivent:

$$E_{int} = \frac{3\varepsilon_m}{\varepsilon + 2\varepsilon_m} E \quad (\text{III.22})$$

La polarisabilité de la nanoparticule s'écrit:

$$\alpha = 3V \frac{\varepsilon - \varepsilon_m}{\varepsilon + 2\varepsilon_m} \quad (\text{III.23})$$

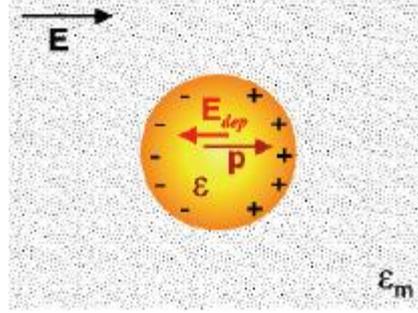


Figure.3.8 : Interaction entre une nanoparticule métallique de rayon R et un champ extérieur dans l'approximation quasistatique [65].

Les sections efficaces s'écrivent donc :

$$\sigma_{ext} = 3V\epsilon_m^{3/2} \frac{w}{c} \frac{3\epsilon_2}{(\epsilon_1 + 2\epsilon_m)^2 + (\epsilon_2)^2} \quad (\text{III.24})$$

$$\sigma_{diff} = (3V)^2 \epsilon_m^2 \left(\frac{w}{c}\right)^4 \frac{(\epsilon_1 - \epsilon_m)^2 + (\epsilon_2)^2}{(\epsilon_1 + 2\epsilon_m)^2 + (\epsilon_2)^2} \quad (\text{III.25})$$

On retrouve la dépendance en w^4 de σ_{diff} , caractéristique de la diffusion Rayleigh de particules nanométriques. Pour une même nanoparticule, le rapport des sections efficaces de diffusion et d'extinction est proportionnel au volume V :

$$\frac{\sigma_{diff}}{\sigma_{ext}} \propto \frac{V}{\lambda^3} \quad (\text{III.26})$$

Lors de l'excitation des électrons de conduction engendrée par l'interaction avec un champ électromagnétique extérieur, il existe parfois une condition de résonance. En effet, les constantes diélectriques dépendent de la longueur d'onde employée et d'après l'équation (3.22), l'exaltation du champ à l'intérieur de la nanoparticule est susceptible d'être résonante à condition qu'il existe une pulsation w_r qui minimise le module du dénominateur $|\epsilon + 2\epsilon_m|$ [62,66,67]. Cette condition peut être satisfaite dans les métaux pour lesquels la partie réelle du constant diélectrique est négative dans le domaine optique.

Au voisinage de w_r (fréquence de résonance), le confinement diélectrique conduit à une résonance dans le spectre d'absorption et de diffusion d'une nanoparticule métallique: c'est le phénomène de résonance plasmon de surface. D'un point de vue classique, le champ extérieur exerce une force sur les électrons qui constituent la nanoparticule métallique [68].

Le champ polarise donc le cortège électronique en créant une accumulation de charges négatives d'un côté de la nanoparticule. A résonance, le centre de masse du nuage électronique oscille à la fréquence du champ appliqué autour de sa position d'équilibre. En

oscillant, la densité surfacique de charge rayonne un champ dont l'intensité, proportionnelle à σ_{diff} , est maximale à w_r .

De nombreux paramètres entrent en jeu dans la position et la largeur de la résonance plasmon. Sa position dépend bien évidemment de la nature du métal (dans le vert pour l'or et le bleu pour l'argent), mais aussi de la matrice. Enfin, la taille et la forme des nanoparticules jouent aussi un rôle.

III.2.2 THEORIE DE MILIEU EFFECTIVE (THEORIE DE MAXWELL GARNETT)

Au cours des dernières années, il existe une richesse littérature couvrant la science et la technologie de nanoparticules d'or, en particulier ceux que concernent leurs propriétés optique [69 – 72]. Une grande partie de l'intérêt a été porté sur la résonance plasmonique d'une suspension diluées de particules sphériques, qui a une couleur varié de rouge à pourpre avec une large pic d'absorption centré à environ de 520 nm. L'oscillation des plasmons de surface dans les nanoparticules métalliques est considérablement modifiée si les particules sont concentrées dans un milieu réactif de telle sorte que les particules individuelles sont reliées électroniquement entre eux. Il a été vu théoriquement et expérimentalement que, lorsque les particules sphériques individuels d'or sont en proximité les uns aux autres, le couplage électromagnétique entre particules devient effective pour des distances particule-particule plus petites que cinq fois le rayon de la particule ($d \leq 5R$, où d est la distance de centre à centre et R le rayon des particules) et peut conduire à des spectres d'extinction plus compliqué en fonction de la taille et de la forme de l'ensemble de particules formée. En conséquence, leur résonance plasmonique est décalée vers le rouge jusqu'à 300 nm [73,74,75]. Cette effet est négligeable si $d > 5R$ mais devient de plus en plus importante pour les plus petite distances. Si le couplage entre particules est plus fort que le couplage à l'intérieur du milieu environnant, la théorie de Mie développé pour des solutions très diluées et des particules isolées échoue à décrire le spectre d'absorption optique. Des approches théoriques standard basées sur les calculs de champ moyen à une longue limite de longueur d'onde sont souvent appliquées pour estimer les paramètres efficaces des métamatériaux au domaine optique tel que les théories du maxwell Garnett (MG) et du Bruggeman. Les deux approches déterminent les paramètres constitutifs macroscopiques en considérant la réaction des champs induits dans les inclusions incluse dans un milieu colloïdale. Elles sont des extensions de la formulation de Clausius-Mossotti et diffèrent de la façon par laquelle les inclusions et le milieu extérieur sont distingués.

La théorie prédite par J.C. Maxwell Garnett (1904) a été appliquée avec succès à ce problème pour expliquer le comportement d'absorption optique des nanoparticules métalliques dans un ensemble très dense. cette théorie est strictement valable dans la limite quasi-statique ($2R \ll \lambda$) avec de petites distances interparticulaires mais peut être généralisée à diverses formes des particules.

Tandis que les particules métalliques isolées sont caractérisés par les propriétés de leurs matériaux, longueurs caractéristiques, les formes géométriques, et ainsi de suite, les

particules agrégées sont caractérisés par leur longueur de corrélation, facteurs de remplissage, ...etc. Le facteur de remplissage f est donné par:

$$f = \frac{V_{particule}}{V_{échantillon}} \quad (\text{III.27})$$

La fonction diélectrique d'une particule de l'échantillon est la somme de toutes les contributions à la polarisation électrique, y compris l'effet de retardement entre les particules voisines. Un grand nombre de lois de mélange ont pour origine la théorie développée dans la deuxième moitié du 19^{ème} siècle par Clausius-Mossotti [62, 77] pour calculer la permittivité d'un diélectrique homogène. Dans cette théorie, chaque atome (ou molécule) du matériau est assimilé à une sphère conductrice parfaite. Sous l'action d'un champ électrique extérieur, les nuages électroniques des couches périphériques se déforment entraînant un déplacement du barycentre des charges. Chaque atome (ou molécule) se comporte alors comme un dipôle.

La détermination de la polarisation totale du matériau passe par un raisonnement microscopique dont la difficulté réside dans la détermination du champ vu par chacun des dipôles [62]. En effet, le champ local \vec{E}_{loc} vu par un dipôle (i) est la somme du champ macroscopique appliqué \vec{E} et des champs \vec{E}_j créés par tous les autres dipôles (j).

$$(\vec{E}_{loc})_i = \vec{E} + \sum_{j \neq i} \vec{E}_j \quad (\text{III.28})$$

La polarisation totale \vec{P} qu'acquiert le matériau est la somme de tous les moments dipolaires individuels définis à partir de la polarisabilité α (d'origine électronique, ionique...):

$$\vec{P} = \sum_i \vec{p}_i = \sum_i N_i \alpha_i (\vec{E}_{loc})_i \quad (\text{III.29})$$

Où N_i est le nombre de molécules par unité de volume. La permittivité est définie à partir du champ de déplacement électrique \vec{D} dont le lien avec la polarisation est donné par :

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} \quad (\text{III.30})$$

D'où l'expression de la polarisation \vec{P} :

$$\vec{P} = (\epsilon - \epsilon_0) \vec{E} \quad (\text{III.31})$$

En combinant les équations (3. 29) et (3. 31), nous obtenons :

$$(\epsilon - \epsilon_0) \vec{E} = \sum_i N_i \alpha_i \vec{E} + \sum_i \sum_{j \neq i} N_i \alpha_i \vec{E}_j \quad (\text{III.32})$$

La polarisation totale du matériau se décompose en deux termes, le premier représente l'interaction de chaque dipôle avec le champ appliqué. Le second terme représente les interactions de tous les dipôles entre eux. Le calcul de ces interactions est en général impossible sauf dans le cas particulier d'arrangements périodiques. Lorentz [78] proposa en 1880 une méthode pour le calcul du champ local. L'artifice choisi par Lorentz

fut de diviser le diélectrique en deux régions dont la frontière de séparation est une sphère, appelée sphère de Lorentz. Celle-ci est centrée sur le dipôle où l'on cherche à calculer le champ local.

La cavité de Lorentz est choisie suffisamment grande pour contenir un grand nombre de dipôles et suffisamment petite pour considérer que le champ et la polarisation qui règnent à l'extérieur de la cavité sont uniformes.

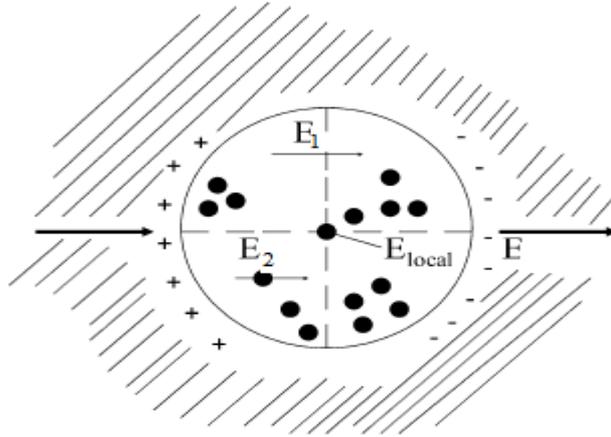


Figure 3.9. Concept de sphère de Lorentz appliqué aux particules agrégées.

Le champ local vu par le dipôle central est alors la contribution de trois termes :

$$\vec{E}_{loc} = \vec{E} + \vec{E}_1 + \vec{E}_2 \quad (\text{III.33})$$

\vec{E} est le champ appliqué (éventuellement corrigé du champ dépolarisant macroscopique de l'échantillon lorsque celui-ci est de dimensions finies).

\vec{E}_1 est le champ régnant à l'intérieur de la cavité vide de Lorentz et créé par tous les dipôles extérieurs à la sphère. Dans l'hypothèse d'une polarisation extérieure uniforme, le champ dans le cas d'une cavité sphérique s'écrit :

$$\vec{E}_1 = \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0} \quad (\text{III.34})$$

\vec{E}_2 est le champ créé par l'ensemble des dipôles contenus dans la cavité. L'hypothèse de Lorentz est de considérer que ce champ est nul.

$$\vec{E}_2 = 0 \quad (\text{III.35})$$

Cette hypothèse n'est vérifiée de façon rigoureuse que dans le cas de répartition aléatoire comme dans les gaz, les liquides non polaires ou bien dans le cas des cristaux à symétrie cubique. Le champ local vu par le dipôle au centre de la cavité de Lorentz s'écrit alors :

$$\vec{E}_{loc} = \vec{E} + \vec{E}_1 + \frac{\varepsilon + 2\varepsilon_0}{3\varepsilon_0} \vec{E} \quad (\text{III.36})$$

Exprimée en terme de polarisabilité, cette expression permet de retrouver la relation bien connue de Clausius-Mossotti :

$$\frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\varepsilon + 2\varepsilon_0} = \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum_i N_i \alpha_i \quad (\text{III.37})$$

La polarisabilité d'une particule sphérique avec une fonction diélectrique ε et un rayon R est défini comme suit:

$$\alpha = \frac{\varepsilon - \varepsilon_m}{\varepsilon + 2\varepsilon_m} R^3 \quad (\text{III.38})$$

Si l'approximation quasistatique est satisfaite, le système peut être remplacé par *un milieu effectif*. Le milieu effective acte approximativement comme un matériel homogène et peut être décrit par *la fonction diélectrique effective*, $\varepsilon_{eff} = \varepsilon_{1,eff} + i\varepsilon_{2,eff}$, de l'échantillon.

La relation de Clausius Mossotti décrit la relation entre ε_{eff} et α [62,77]:

$$\frac{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_m}{\varepsilon_{eff} + 2\varepsilon_m} = \frac{4\pi}{3} \sum_i N_i \frac{\varepsilon - \varepsilon_m}{\varepsilon + 2\varepsilon_m} R^3 \quad (\text{III.39})$$

En introduisant le facteur de remplissage f , l'équation précédente peut être également exprimée sous la forme :

$$\frac{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_m}{\varepsilon_{eff} + \xi\varepsilon_m} = f \frac{\varepsilon - \varepsilon_m}{\varepsilon + \xi\varepsilon_m} \quad \text{avec } \xi = 2 \quad (\text{III.40})$$

En traitant un matériel composé de deux inclusions équivalentes, la formule de Maxwell Garnett est changée à la forme:

$$\frac{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_m}{\varepsilon_{eff} + \xi\varepsilon_m} = f_1 \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_m}{\varepsilon_1 + \xi\varepsilon_m} + f_2 \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_m}{\varepsilon_2 + \xi\varepsilon_m} \quad (\text{III.41})$$

CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons présenté une brève description des techniques principales permettant de piéger la lumière en se concentrant sur l'utilité des plasmons de surface et l'influence de nanoparticules métalliques sur l'amélioration du champ localisé et le piégeage de la lumière.

Les plasmons de surface sont des modes particuliers pouvant se propageant le long de l'interface entre le métal et le vide (ou le milieu diélectrique). Ces modes peuvent

améliorer l'absorption optique de la cellule photovoltaïque. Les études expérimentales ont montré que la performance des cellules en couche mince peut être améliorée de manière significative par la déposition des nanoparticules métalliques sur la couche photo-active.

CHAPITRE IV: PROPRIETES PHOTOVOLTAÏQUES DES CONTACTS METAL/SEMICONDUCTEUR

INTRODUCTION

Quelque soit la structure d'une cellule solaire, une optimisation de ses paramètres est nécessaire pour avoir un bon rendement. Habituellement, les paramètres à optimiser sont l'épaisseur de la cellule, les niveaux et les profils de dopage, la configuration des contacts et le confinement optique. L'optimisation de la cellule solaire comprend donc l'étude de l'influence de ces paramètres sur le rendement afin d'obtenir une structure conduisant au rendement maximum.

La simulation numérique est couramment utilisée pour l'optimisation des cellules solaires. En effet elle présente les avantages suivants [21]:

- Elle permet d'éviter la fabrication de plusieurs prototypes de cellules avec des paramètres différents.
- Elle est indépendante de la technologie utilisée (on peut faire donc varier largement les paramètres).
- On peut séparer l'influence de chaque zone de la cellule dans le cas de paramètres interdépendants.

Dans ce chapitre, nous analysons les propriétés photovoltaïques des contacts Schottky, nous analysons dans l'environnement Atlas, pour un éclairage et température donnés, les propriétés électriques (courant, tension et puissance) et optiques de ces cellules. Ensuite, nous étudions l'effet d'ajout des textures et d'une couche antireflet sur la surface de cellules.

Enfin, Nous illustrons comment peuvent les plasmons de surface améliorer l'absorption optiques des cellules photovoltaïques à couches minces. Nous faisons des études théoriques et simulation de cellules solaires à couches mince en a-Si avec une couche périodique de nanocylindres en argent sur la surface. Nous également effectuée des études d'optimisation de la taille des particules, la distance entre les particules et le milieu diélectrique, permettant d'obtenir une absorption maximale dans le substrat.

IV.1 CARACTERISTIQUES ELECTRIQUE D'UNE CELLULE PHOTOVOLTAÏQUE SCHOTTKY

Les caractéristiques électriques courant-tension ($I_{pv} - V_{pv}$) et puissance-tension ($P_{pv} - V_{pv}$) obtenus pour un éclairage de 1000 W/m^2 à la température ambiante sont représentés sur la figure.4.1. Nous avons vu que le courant reste indépendant de la tension pour des tensions inférieures à 0.35V , le dispositif se comporte comme un générateur de courant. Ce courant est dû au courant de court-circuit généré par le rayonnement solaire. A

partir des tensions supérieures à 0.35V, le courant varie et la tension reste pratiquement constante. Le dispositif se comporte comme un générateur de tension.

La puissance fournie par la cellule passe par un maximum P_{max} qui représente le fonctionnement optimal de la cellule, ce maximum est appelé point de puissance maximale (PPM) de la cellule [78,79] et il est caractérisé par :

$$V_{pv} = V_{optimal}, \quad I_{pv} = I_{optimal} \quad (IV-1)$$

$$P_{max} = I_{optimal} \cdot V_{optimal} \quad (IV-2)$$

Ces résultats de simulation montrent que la cellule photovoltaïque présente un générateur de courant non linéaire.

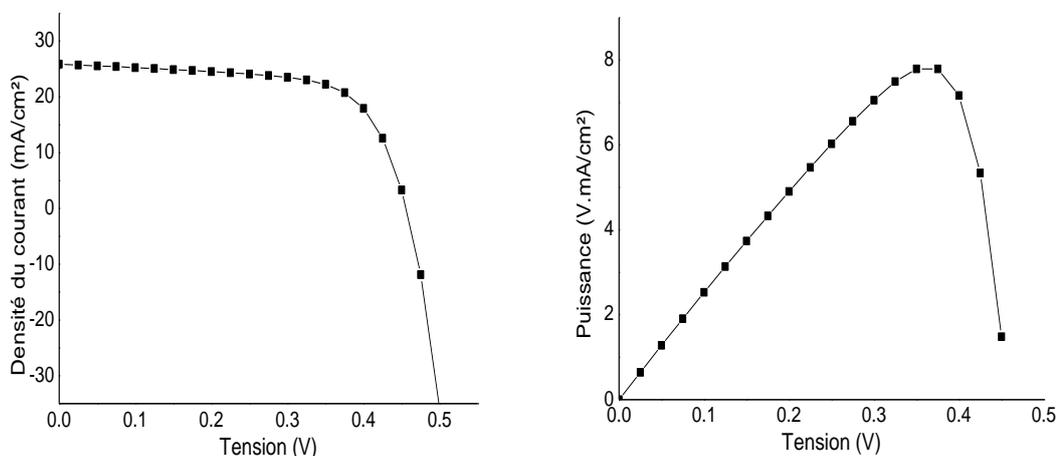


Figure.4.1. Caractéristiques courant-tension et puissance-tension d'une structure Schottky au silicium sous un éclairement $b1=1000W/m^2$, $T=25^\circ$, $\lambda=0.5\mu m$.

IV.1.1 EFFET DE TEMPERATURE ET D'ECLAIREMENT

Les cellules solaires sont sensibles à la température. L'augmentation de la température réduit la largeur de la bande interdite du semiconducteur, effectuant de ce fait la plupart des paramètres de matériau semiconducteur. La diminution de la largeur de bande d'un semiconducteur avec l'augmentation de la température peut être considérée en tant qu'augmentation de l'énergie des électrons du matériau. Une énergie inférieure est donc nécessaire pour casser la liaison. Dans le modèle de liaison de la bande interdite de semiconducteur, une réduction de l'énergie de liaison permet également de réduire la largeur de la bande. Par conséquent, l'augmentation de la température réduit la largeur de la bande.

Sur les figures.4.2 et 4.3 sont représentés les résultats de simulations concernant l'influence de l'intensité d'éclairement et de la température sur les caractéristiques courant-tension et puissance-tension. Il apparaît que la puissance fournie par la structure dépend de l'intensité de l'éclairement et de la tension aux bornes de la cellule. La puissance maximal

et très sensible aussi à l'intensité de l'éclairement : lorsque l'éclairement diminue de 100W/m^2 , la puissance diminue de 10.65%, par contre, cette puissance diminue légèrement avec la température : lorsque la température augmente de 10°C pour un éclairement de 1000W/m^2 , la puissance diminue de 5.8%.

Les résultats obtenus des propriétés photovoltaïques correspondant au point de puissance maximale sont résumés dans le tableau.1 pour les différentes intensités d'éclairement, et dans le tableau.2 pour les différentes températures.

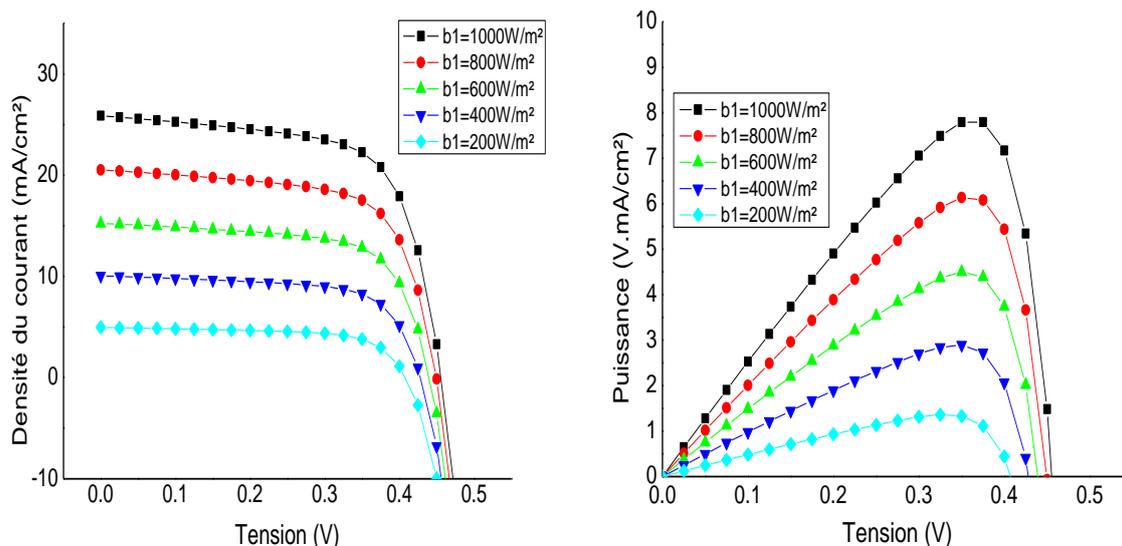


Figure.4.2. Caractéristiques courant-tension et puissance-tension d'une structure Schottky au silicium sous différentes intensité d'éclairement, $T=25^\circ$, $\lambda=0.5\mu\text{m}$.

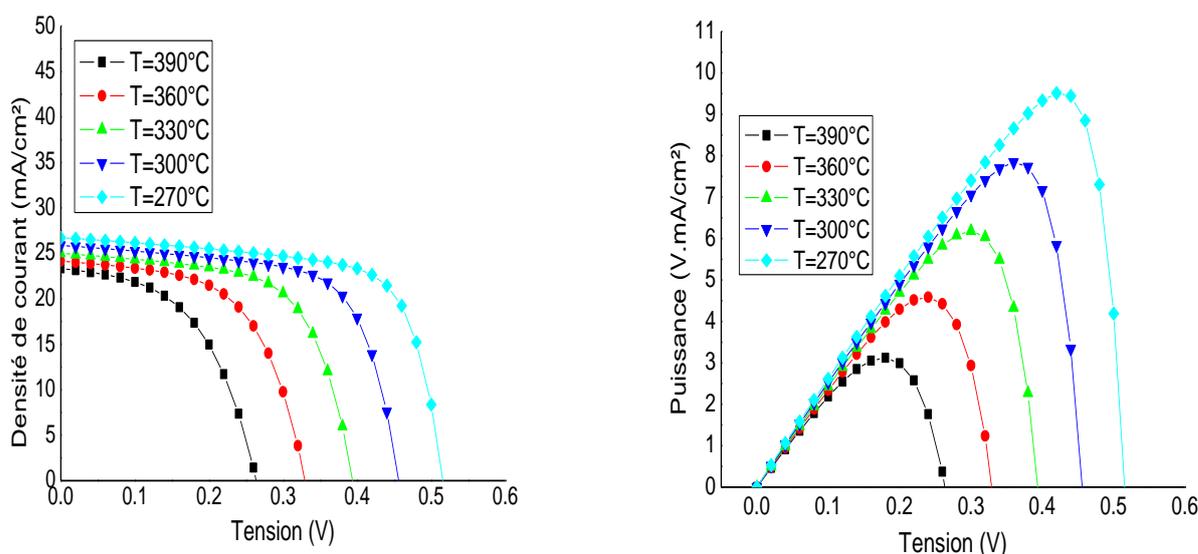


Figure.4.3. Caractéristiques courant-tension et puissance-tension d'une structure Schottky au silicium pour différentes température, $b1=1000\text{W/m}^2$, $\lambda=0.5\mu\text{m}$.

Tableau 2. Facteurs de qualité obtenue pour une structure Schottky pour différents éclairagements.

Intensité d'éclairément (W/m ²)	FF	J _{sc} (mA/cm ²)	V _{oc} (V)	η (%)
200	0,6728	4,95396	0,40909	6,8177
400	0,6709	10,0537	0,42889	7,23255
600	0,6686	15,2564	0,44089	7,49555
800	0,6668	20,5357	0,44964	7,69651
1000	0,6631	25,87	0,4541	7,79

Tableau 2. Facteurs de qualité obtenue pour une structure Schottky pour différentes températures.

Température (°C)	FF	J _{sc} (mA/cm ²)	V _{oc} (V)	η (%)
390°	0,50723	23,3294	0,26388	3,12258
360°	0,57447	24,166	0,33014	4,58314
330°	0,62703	25,0197	0,39422	6,18464
300°	0,66438	25,8743	0,4563	7,84396
270°	0,69073	26,7182	0,51597	9,52223

Nous avons montré que plus la température de la cellule est basse, plus son rendement de conversion est meilleur. Une élévation de la température de un degré Celsius occasionne une perte de rendement de l'ordre de 0.58%, on compte en générale une baisse de 1.989mV/°C [80]. Ceci a pu être dû à l'augmentation de la longueur de diffusion de porteurs dans le substrat et au décalage de la limite d'absorption de la bande interdite de semi-conducteur. Notons que la réponse spectrale ne varie pas de façon appréciable avec l'éclairément.

Le tableau.1 montre aussi que le courant de court-circuit est très sensible à l'éclairément et montre une relation linéaire avec l'intensité, lorsque l'éclairément varie de 100W/m², ce courant varie de 10.31% contre 1.052% lorsque la température varie de 10°C. Cette réduction en J_{sc} mène une dégradation du rendement de conversion.

La tension du circuit-ouvert varie très peu avec l'éclairement, pour une variation de 10% en intensité d'éclairement, la tension V_{oc} varie de 0.98%.

La tension du circuit-ouvert diminue aussi légèrement avec la température de façon linéaire, pour un éclairement de 1000W/m^2 , lorsque la température varie de 10°C , cette tension varie de 3.8%, tandis qu'elle varie assez peu au cours de la journée. Ces résultats sont totalement compatibles avec ceux obtenus dans la littérature [81,82,83].

Concluons que pour le calcul d'une installation solaire, il faut donc tenir compte du fait que l'éclairement et la température varient simultanément. Ce point est très souvent négligé lors du dimensionnement d'ensembles solaires photovoltaïques.

Lors du dimensionnement d'une installation solaire, il conviendra donc de tenir compte des conditions et des variations climatiques du site choisi. Notons enfin que le rendement global d'un panneau est déterminé par la cellule la plus faible. Un ombrage partiel est donc très mauvais pour le rendement des panneaux solaires.

IV.1.2 REDUCTION DES PERTES DUES A LA REFLEXION

IV.1.2.1 REVÊTEMENTS ANTI-REFLECHISSANTS

Le facteur de base qui affecte l'efficacité de la cellule solaire est la réflexion de la lumière à partir de sa face avant. Le coefficient de réflexion peut être réduite, en recouvrant la partie supérieure de la surface de cellules solaires par des couches antireflets (CAR). Le principe d'action de ces couches est basé sur l'interférence des faisceaux lumineux dans les couches diélectriques minces.

Revêtements simples AR sont généralement composées d'une couche d'un matériau isolant transparent d'épaisseur $d \approx \lambda/4$ où λ la longueur d'onde optique. Tels revêtements réduisent de manière significative la réflectivité de la lumière à la longueur d'onde de conception, cependant, Loin de cette longueur d'onde, leur rendement est faible. Actuellement, les revêtements AR multicouches plus sophistiqués sont utilisés pour améliorer la détection de la lumière à une large bande.

Pour une seule couche d'antireflet placée entre deux matériaux d'indice de réfraction n_1 et n_2 , si l'épaisseur de la couche diélectrique est égale à :

$$d = \frac{\lambda}{4n} \quad (\text{IV-3})$$

On obtiendra l'annulation des faisceaux réfléchis à l'interface air/CAR et CAR/semiconducteur.

n est l'indice de réfraction de la couche antireflet :

$$n = \sqrt{n_1 n_2} \quad (\text{IV-4})$$

Différentes CAR sont utilisées en photovoltaïque tel que : TiO_2 ($n=2.2$), MgF_2 ($n=1.35$), ZnS ($n=2.3$), SiN_x ($n=1.6-2.4$) et SiO_2 ($n=1.46$).

La figure.4.4 montre la caractéristique $I-V$ en présence et en absence d'une couche antireflet en nitrure pour un angle d'incidence 90° et intensité d'éclairement 1000W/m^2 . Il est évident que la valeur actuelle du courant en présence de CAR est plus élevée. Cela est dû au piégeage de la lumière par cette couche qui a réduit la réflexion de la lumière.

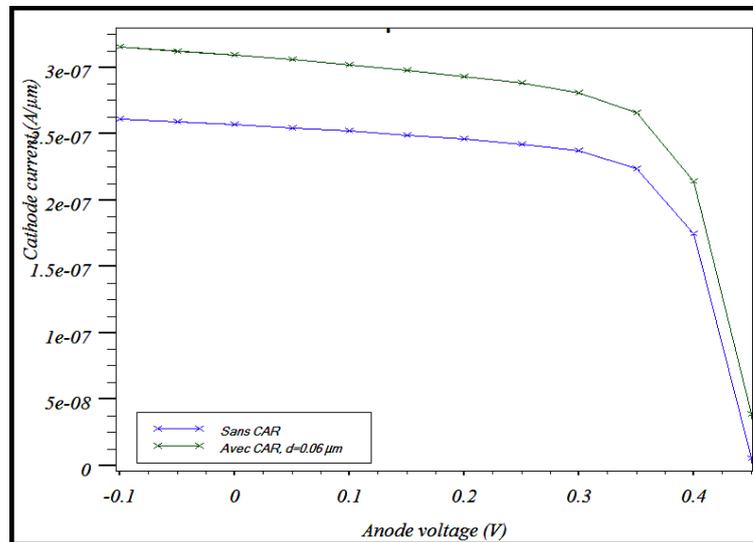


Figure.4.4 Courant électrique en présence et absence d'une couche AR en Nitrure, $\theta_i = 90^\circ$, $\lambda = 0.5\mu\text{m}$.

Dans le tableau.3, nous voyons les résultats des simulations concernant l'influence de l'épaisseur de la couche AR en Nitrure sur les propriétés photovoltaïques de la structure. Nous avons trouvé que le rendement augmente de 6.53% sans CAR à 7.92% pour l'épaisseur optimale $0.06\mu\text{m}$ de CAR. On peut dire que la performance de la structure augmente par 21.28% par rapport la structure initiale sans CAR. Nous avons trouvé aussi que le courant de court-circuit J_{sc} varie avec la variation de l'épaisseur de CAR, tandis que la tension du circuit ouvert V_{oc} est presque la même à 0.45V.

Tableau.3. Facteurs de qualité obtenue pour une structure Schottky pour différentes épaisseurs de la couche AR.

$D (\mu\text{m})$	η (%)	FF	J_{sc} (mA/cm ²)	V_{oc} (V)
0	6,53	0,677	21,4	0,4506
0,02	6,76	0,674	22,23	0,4512
0,04	7,41	0,666	24,53	0,4531
0,06	7,92	0,662	26,3	0,4545
0,08	7,45	0,666	24,69	0,4532
0,1	6,79	0,6763	22,33	0,4513

La figure.4.5 présente les caractéristiques $I-V$ pour différents genres de CAR déposée sur la cellule solaire. Le courant de court-circuit J_{sc} varie de $25,06\text{mA/cm}^2$ pour une couche de SiO_2 à $25,87\text{mA/cm}^2$ pour Si_3N_4 et de $29,64\text{ mA/cm}^2$ pour double couche AR à $30,45\text{ mA/cm}^2$ pour trois couches AR. Cela signifie que J_{sc} pour Si_3N_4 est plus élevé que pour SiO_2 . Tandis que, V_{oc} reste presque constant à $0,45\text{ V}$ quelque soit le genre de CAR. Les propriétés photovoltaïques sont résumées dans le tableau.2 pour les angles 45° , 60° et 90° .

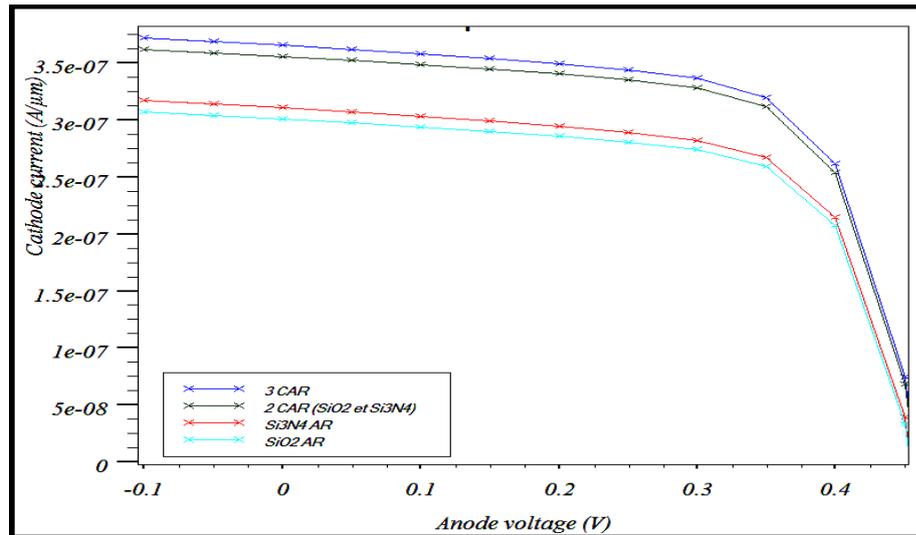


Figure.4.5. Les caractéristiques $I-V$ pour différents genres de CAR à 90° .

Tableau 4. Facteurs de qualité obtenue d'une structure Schottky pour différentes couches AR.

Genre de CAR	90°			60°			45°		
	η (%)	J_{sc} (mA/cm^2)	V_{oc} (V)	η (%)	J_{sc} (mA/cm^2)	V_{oc} (V)	η (%)	J_{sc} (mA/cm^2)	V_{oc} (V)
Sans CAR	6,53	21,4	0,450	4,248	13,86	0,434	3,21	10,7	0,424
SiO_2	7,56	25,06	0,453	4,57	15,02	0,436	3,21	10,7	0,424
Si_3N_4	7,79	25,87	0,454	4,71	15,52	0,437	3,52	11	0,427
2CAR	9,08	29,64	0,457	5,52	17,87	0,443	3,83	12,6	0,430
3CAR	9,31	30,45	0,457	5,66	18,38	0,445	3,83	12,6	0,430

À l'angle 90° , la performance de la pile solaire en silicium protégée par deux couches AR (SiO_2 et Si_3N_4) a augmenté par 39.05%. Ceci est suivi de 29.94% à 60° et de 19.31% à 45° , ces résultats sont similaires aux résultats obtenus plus tôt dans [84]. Il est évident ici que la performance de la pile solaire est meilleure avec la présence de multiples couches AR.

IV.2 AMELIORATION PLASMONIQUE

IV.2.1 STRUCTURE MODELISEE

Pour étudier l'amélioration plasmonique de cellules solaires en couches minces, nous considérons une cellule solaire avec une couche photo active en silicium amorphe hydrogéné ($a - \text{Si} : \text{H}$) de 300 nm d'épaisseur, une couche de revêtement d'oxyde d'indium-étain (ITO) de 50 nm d'épaisseur, et un contact en face arrière en Ag de 50 nm d'épaisseur (Fig.4.6). Nous supposons que la surface supérieure d' ITO est uniformément couverte par un réseau périodique de nanocylindres d'Ag de rayon a et de hauteur h ; nous supposons également une distance S entre les centres des inclusions adjacentes. Ces nanoparticules métalliques peuvent fortement augmenter le piégeage de la lumière dans les cellules à couche mince par le couplage avec les modes guidant d'ondes dans la couche active [48,49].

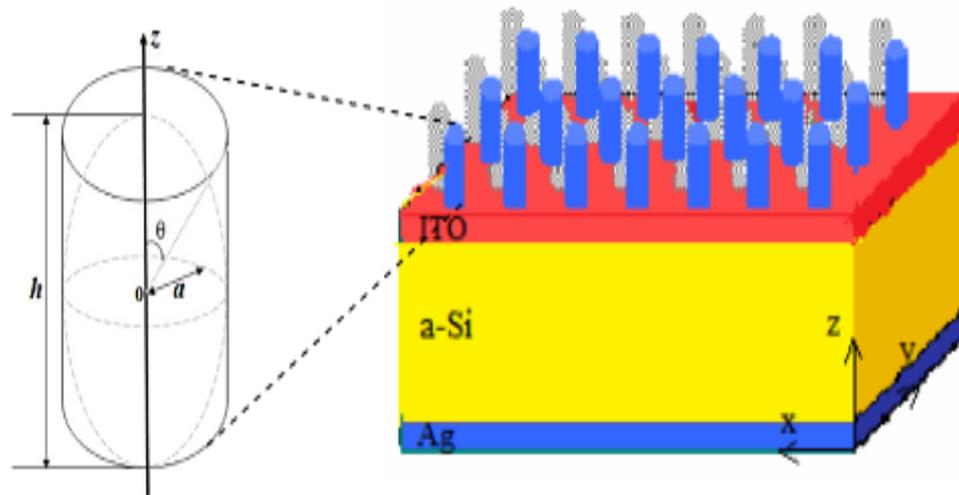


Figure.4.6. Structure de base de la cellule solaire étudiée dans ce chapitre.

IV.2.2 LA CONSTANT DIELECTRIQUE EFFECTIVE D'UN METAMATERIEL OPTIQUE STRUCTUREE AVEC DES NANOCYLINDRES EN ARGENT

En ce qui concerne l'estimation du champ local, la théorie de MG calcule les paramètres macroscopiques à partir de la moyenne des champs électrostatiques produits par les dipôles induits dans les inclusions sphériques et correspond au premier terme de l'expansion des champs diffusés obtenu par la théorie de Mie [85, 86]. Par conséquent, il

néglige les inclusions avec des géométries non sphériques. Pour surmonter cette limitation, plusieurs corrections ont été proposées pour mieux estimer des champs induits par l'onde électromagnétique incidente, qui dépend fortement de la géométrie des particules et de la composition du matériau. Ces corrections peuvent être exprimées dans le facteur de dépolarisation γ de la permittivité efficace qui est en général un tenseur [87]. Une discussion qualitative sur la correction introduite par γ dans les modèles Bruggeman et MG ont été brièvement effectuée dans [88] en utilisant l'hypothèse d'une approximation quasi-statique. L'approche de Meier-Wokaun a été combinée en [86] avec la méthode fonction de Green pour formuler rigoureusement le modèle de MG pour des structures cylindriques. Nous l'appliquons pour calculer la permittivité effective d'un métamatériau optique composé par un réseau périodique de nanotubes en argent incorporés dans un fond de silice (figure.4.7).

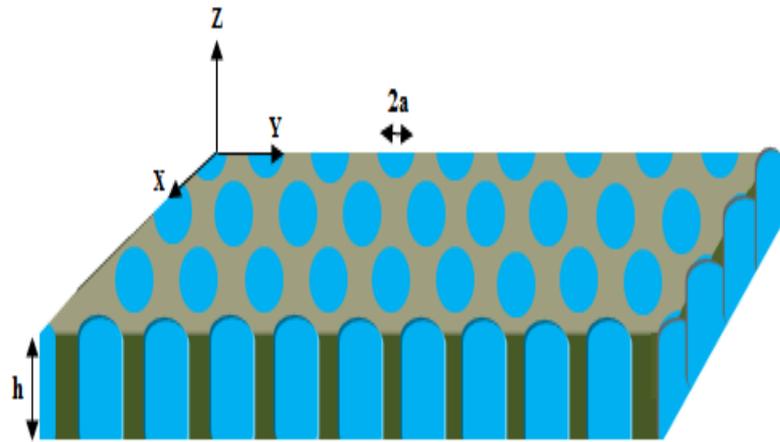


Figure. 4.7. Arrangement d'un métamatériau composé par des nanocylindres argentés (régions bleues) inclus dans une matrice de silice (région grise).

Le modèle de MG original est adressé pour des particules sphériques et adopte $\zeta = 2$ (facteur de correction). D'autres géométries ont $\zeta=1$ ou tendent vers l'infini, en fonction de l'orientation de leurs axes de révolution par rapport à la direction d'incidence de la lumière. En effet, correspondent à la partie statique dans l'expansion de modes dans la théorie de Mie. Pour les termes d'ordre supérieur dans cette expansion, nous pouvons réaliser une évaluation plus complète du facteur de correction ζ :

$$\zeta = \frac{1}{\gamma} - 1 \quad (\text{IV-5})$$

où γ est appelé facteur de dépolarisation.

Remplaçant (IV-5) à (III-41), l'expression de MG est modifiée pour expliciter la dépendance avec le facteur de dépolarisation:

$$\varepsilon_{eff} = \varepsilon_m + \frac{f \varepsilon_m (\varepsilon - \varepsilon_m)}{\varepsilon_m + \gamma (1-f) (\varepsilon - \varepsilon_m)} \quad (\text{IV-6})$$

Selon l'approche de Meier-Wokaun pour des nanotiges avec section circulaire (Figure. 4.8), on définit le champ électrique de dépolarisation comme:

$$\vec{E}_d = -4\pi \left(\tilde{L} - \kappa^2 \frac{V_{pr}}{4\pi} \tilde{C} - j\kappa^3 \frac{V_{pr}}{4\pi} \tilde{I} \right) \cdot \vec{P} \quad (IV-7)$$

Où κ est le nombre d'onde. V_{pr} est le volume du sphéroïde allongé inscrite dans le cylindre, \tilde{I} est la tenseur dyadique identité, \tilde{L} est le tenseur de dépolarisation statique et \tilde{C} est le tenseur dynamique:

$$\tilde{C} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{3}{4(h/2)} \ln \left| \frac{1+E}{1-E} \right| \end{bmatrix}, E^2 = 1 + \left(\frac{a}{h/2} \right)^2 \quad (IV-8)$$

$$\tilde{L} = \begin{bmatrix} (1/2) \cos \theta & 0 & 0 \\ 0 & (1/2) \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \cos \theta \end{bmatrix} \quad (IV-9)$$

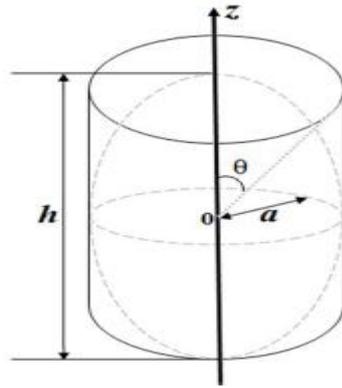


Figure.4.8. Représentation schématique d'un nanotiges avec une section transversale circulaire. Les lignes pointillées délimitent le sphéroïde allongé inscrit dans le nanotiges. Le point 0 est le centre de gravité du cylindre.

Les principales différences entre le champ de dépolarisation électrique pour des inclusions cylindriques et celui correspondant pour sphéroïdes allongés réside dans les expressions du facteur de dépolarisation statique \tilde{L} et le tenseur dynamique \tilde{C} . La polarisation et la polarisabilité peuvent être décomposées à leurs composantes longitudinales et azimutales. Les composants de la polarisabilité α pour un cylindre sont donnés par:

$$\alpha_{\rho,z} = \frac{V_{cyl}}{4\pi} \frac{\varepsilon - 1}{1 + \gamma_{\rho,z}(\varepsilon - 1)} \quad (IV-10)$$

Où V_{cyl} est le volume de cylindre, avec $V_{pr} = (2/3)V_{cyl}$. Les formulations azimutales et longitudinales de γ sont résumés dans le tableau.5.

Tableau.5. Facteurs de dépolarisation pour: des cylindres, des sphères et des sphéroïdes allongés

cylindre	
γ_{ρ}	γ_z
$\frac{1}{2} \cos \theta - j \frac{k^3}{4\pi} \left(\frac{2}{3} V_{cyl} \right)$	$1 - \cos \theta + \frac{k^2}{4\pi} \left(\frac{2}{3} V_{cyl} \right) C_z - j \frac{k^3}{4\pi} \left(\frac{2}{3} V_{cyl} \right)$
sphères	
γ_{ρ}	γ_z
$\frac{1}{2} \cos \theta - \frac{1}{3} (\kappa r)^2 - j \frac{2}{9} (\kappa r)^3$	$1 - \cos \theta - \frac{1}{3} (\kappa r)^2 - j \frac{2}{9} (\kappa r)^3$
sphéroïdes allongés	
γ_{ρ}	γ_z
$\frac{1}{2} (1 - Z_{pr}) - \frac{\kappa^2}{4\pi} D_{\rho} V_{pr} - j \frac{\kappa^3}{4\pi} \left(\frac{2}{3} V_{pr} \right)$	$Z_{pr} - \frac{\kappa^2}{4\pi} D_z V_{pr} - j \frac{\kappa^3}{4\pi} \left(\frac{2}{3} V_{pr} \right)$

Où C_z est le terme non zéro dans \tilde{C} .

Dans le tableau 1, les paramètres de sphéroïdes allongés sont [86, 89]:

$$Z_{pr} = \frac{1-e^2}{e^3} \left[\frac{1}{2} \ln \left(\frac{1+e}{1-e} \right) - e \right], \quad (IV-11)$$

$$D_z = \frac{3}{2h} \left[\left(\frac{1+e^2}{1-e^2} \right) Z_{pr} + 1 \right], \quad (IV-12)$$

$$D_{\rho} = \frac{3}{e} \left[\frac{1}{2} \ln \left(\frac{1+e}{1-e} \right) - D_z \right] \frac{1}{h}, \quad (IV-13)$$

Avec:

$$e^2 = \frac{h^2/4 - a^2}{h^2/4} \quad (IV-14)$$

Pour le métamatériau montré dans la figure.4.7, le facteur de remplissage f peut être déduit par:

$$f = (2a/D)^2 / [\pi/(12)^{1/2}], \quad (\text{IV-15})$$

Les permittivités relatives ordinaire et extraordinaires sont donnés par:

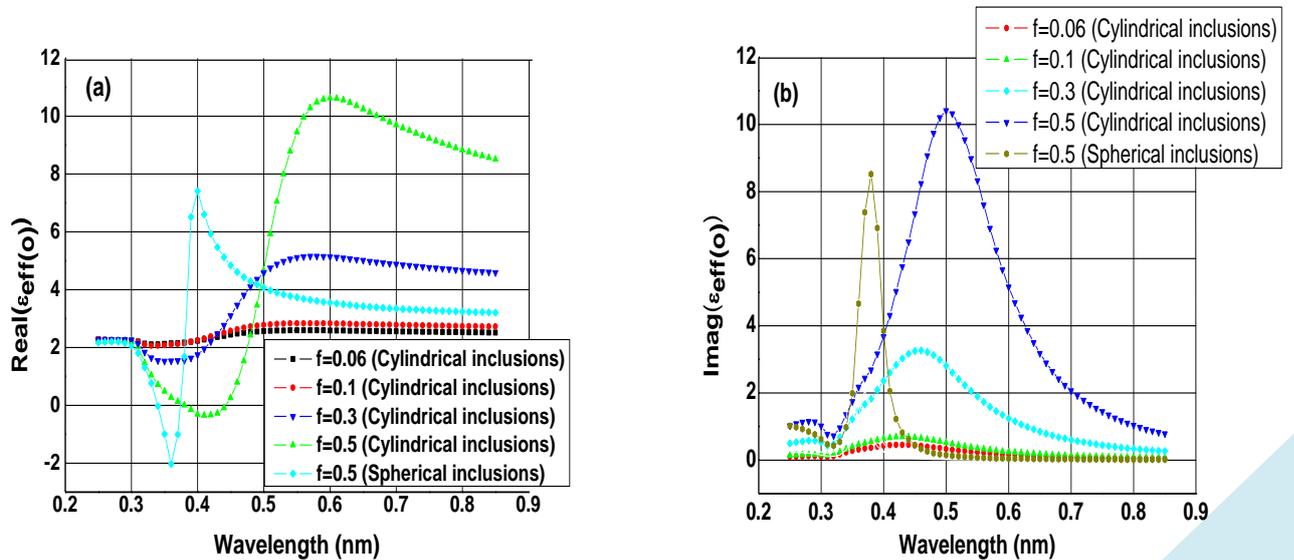
$$\varepsilon_{eff(o)} = \varepsilon_m + \frac{f\varepsilon_m(\varepsilon - \varepsilon_m)}{\varepsilon_m + \gamma\rho(1-f)(\varepsilon - \varepsilon_m)} \quad (\text{IV-16})$$

$$\varepsilon_{eff(e)} = \varepsilon_m + \frac{f\varepsilon_m(\varepsilon - \varepsilon_m)}{\varepsilon_m + \gamma Z(1-f)(\varepsilon - \varepsilon_m)} \quad (\text{IV-17})$$

Les indices o et e se réfèrent à la permittivité ordinaire et extraordinaire, respectivement. Ces permittivités relatives correspondent aux composantes diagonales du tenseur $\tilde{\varepsilon}$:

$$\varepsilon_{eff(o)} = \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} \quad ; \quad \varepsilon_{eff(e)} = \varepsilon_{zz}$$

La figure.4.9 montre les parties réelles et imaginaires de $\varepsilon_{eff(o)}$ et $\varepsilon_{eff(e)}$ des nanoparticules cylindriques en argent noyées dans une matrice de SiO_2 , en fonction de la longueur d'onde, pour les différentes fractions de remplissage. Les calculs ont été effectués en utilisant le modèle corrigé de MG pour les sphères et les inclusions cylindriques. Dans ces calculs, nous avons utilisé la permittivité relative du métal confiné pour le spectre optique. La dépendance de l'indice de réfraction du SiO_2 par la longueur d'onde a été prise de Réf. 90. Dans la Figure.4.9, nous avons comparé les résultats obtenus pour des inclusions cylindriques avec ceux obtenus pour des sphères, pour démontrer qu'une approche précise devrait également prendre en compte la nature des modes excités. La figure (b) montre le décalage bien documentée vers le rouge des valeurs maximales de la partie imaginaire de $\varepsilon_{eff(o)}$, en fonction du facteur de remplissage.



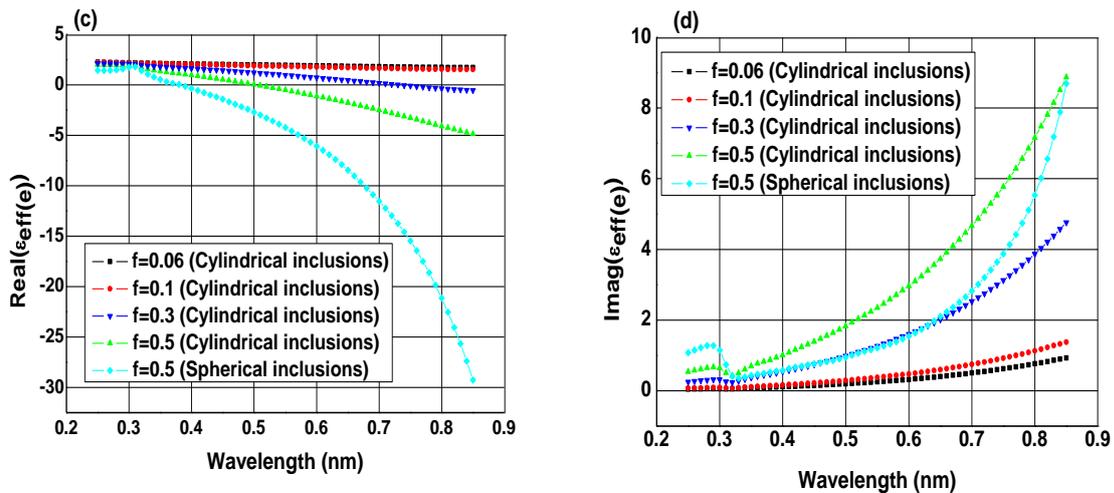


Figure.4.9. Parties réelles et imaginaires des permittivités effectives ordinaires et extraordinaires d'un réseau périodique de nanotubes cylindriques en argent immergés dans une matrice de SiO₂, calculées à partir du modèle corrigé de MG pour sphères et cylindres. $a=0.05 \mu\text{m}$, $S=0.4 \mu\text{m}$, $h=0.2 \mu\text{m}$.

En général, selon les valeurs de la partie réelle, la localisation de zéro-dispersion présente également un décalage vers le rouge avec l'augmentation du facteur de remplissage (Figure.4.9.(a)). Les volumes les plus grands d'inclusions métalliques entraînent une amélioration plus faible de champ associé avec les modes localisés de SP. Ceci implique un décalage vers le rouge et un élargissement de la bande de résonance, comme le montre la comparaison de $\epsilon_{\text{eff}(o)}$. Ce comportement a été signalé précédemment dans Réf. 89.

En ce qui concerne la permittivité effective extraordinaire, nous avons constaté que le modèle corrigé de MG pour des particules sphériques sous-estime la perte. Ce fait est également une conséquence de la taille des particules. Le grandissement de la surface latérale des nanotiges entraîne un grandissement de la partie imaginaire par rapport à celle des sphères.

Dans ces calculs, nous avons utilisé le constant diélectrique corrigé pour les nanoparticules en argent. Cette dépendance de taille se pose parce que le libre parcours moyen des électrons de conduction est comparable à la taille des particules le long de la direction de polarisation. Ces phénomènes sont appelés effets de taille intrinsèque, contrairement aux effets de taille extrinsèques, qui sont des effets de retard électromagnétiques qui apparaissent si la taille des particules est comparable à la longueur d'onde des photons incidents [68]. Ici, nous avons supposé que la taille de nanoparticules affecte uniquement le comportement des électrons libre; par conséquent, $\epsilon(w,a)$ peut être exprimé comme [68]:

$$\varepsilon(w, a) = \varepsilon_{\infty}(w) + \left[w_p^2 \left(\frac{1}{w^2 + \Gamma_{\infty}^2} - \frac{1}{w^2 + \Gamma^2(a)} \right) \right] + i \left[\frac{w_p^2}{w} \left(\frac{\Gamma(a)}{w^2 + \Gamma^2(a)} - \frac{\Gamma_{\infty}}{w^2 + \Gamma_{\infty}^2} \right) \right] \quad (\text{IV-18})$$

Où $\varepsilon_{\infty}(w)$ est le constant diélectrique expérimental du métal massif, $\Gamma(a)$ Le taux de collision total, et Γ_{∞} est le taux de collisions électroniques intrinsèque (électron/électron et électron/phonon) du solide infini. Pour un métal massif en argent, nous avons adopté pour le constant diélectrique $\varepsilon_{\infty}(w)$ les valeurs tabulées de Johnson et Christy [91]. Le taux de collision total $\Gamma(a)$ s'écrit [68,92]:

$$\Gamma(a) = \Gamma_{\infty} + A \frac{v_F}{a} \quad (\text{IV-19})$$

Où v_F est la vitesse de Fermi des électrons, A est un facteur correctif sans dimension appelé coefficient de diffusion de surface. Sa valeur peut être estimée en fonction des modèles théoriques. Il est de l'ordre de 1[92].

IV.2.3 CALCUL DE LA REFLECTIVITE

Parce que la structure proposée est multicouche, nous avons utilisé la méthode matrice de transfert pour un modèle de N-couche. Cette méthode est développée initialement par Abélès [93] pour calculer Les coefficients de réflexion dans le cas d'une structure multicouche plane [94,95]. D'après cette méthode, il est possible d'étudier l'interaction d'une onde électromagnétique pour un ensemble de couches. Cette représentation matricielle explicite le champ électromagnétique après une réflexion sur un nombre fini d'interfaces successives supposées planes et infinies dans le plan perpendiculaire au plan d'incidence.

Ce modèle permet en outre de décrire un système composé de N couches dont les deux extrêmes sont d'épaisseurs semi-infinies. Dans notre système, chaque couche k d'épaisseur d_k est caractérisée par deux paramètres : sa constante diélectrique ε_k et sa perméabilité magnétique μ_k . Nous avons considéré que la première couche est le réseau de nanocylindres et la dernière est la couche du contact en face arrière en argent. Pour chacune des couches, on définit l'indice optique complexe n_k relié à la constante diélectrique ε_k par :

$$n_k^2 = \varepsilon_k = (n_k + ik_k)^2 \quad (\text{IV-20})$$

Où la partie réelle n_k est l'indice de réfraction et la partie imaginaire k_k est le coefficient d'extinction. Un système de N couches est par conséquent défini par un ensemble (n_k, k_k, d_k) . Toutes les couches, sauf la première et la dernière, sont représentées par des matrices de passage M_k , $1 < k < N$, qui relie les amplitudes des composantes tangentielles du champ électromagnétiques à l'interface entre les couches k et $k+1$. Les amplitudes U_1 et V_1 des composantes tangentielles du champ résultant de la première interface sont reliées à celles de U_{N-1} et V_{N-1} du champ résultant de la dernière interface par la relation suivante:

$$\begin{bmatrix} U_1 \\ V_1 \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} U_{N-1} \\ V_{N-1} \end{bmatrix} \quad (\text{IV-21})$$

Nous examinons le cas particulier du milieu homogène, isotrope, et non magnétique où les paramètres caractéristiques du milieu gardent une valeur constante ϵ_k et μ_k à l'interface entre les couches k et $k + 1$. Les éléments de la matrice résultante M , sont définie par le produit des matrices M_k , la matrice M est donnée par :

$$M = \prod_{k=2}^{N-1} M_k \quad (\text{IV-22})$$

Dans le cas d'une onde polarisée- p (TM), les composantes tangentielle sont E_x et H_y , soit $U_j = H_{yj}$ et $V_j = E_{xj}$. La continuité de ces composantes du champ conduit à la définition des matrices de passage M_k :

$$M_k^p = \begin{bmatrix} \cos \beta_k & (-i \sin \beta_k) / q_k^p \\ -i q_k^p \sin \beta_k & \cos \beta_k \end{bmatrix} \quad (\text{IV-23})$$

23)

où on définit q_k l'admittance optique:

$$q_k^p = \left(\frac{\mu_k}{\epsilon_k} \right)^{1/2} \cos \theta_k = \frac{(\epsilon_k - n_1^2 \sin^2 \theta_1)^{1/2}}{\epsilon_k} \quad (\text{IV-24})$$

et β_k le déphasage induit par chaque interface :

$$\beta_k = \frac{2\pi}{\lambda} n_k \cos \theta_k (z_k - z_{k-1}) = \frac{2\pi d_k}{\lambda} (\epsilon_k - n_1^2 \sin^2 \theta_1)^{1/2} \quad (\text{IV-25})$$

Où θ est l'angle d'incidence de la lumière, par rapport à l'interface normale. Dans le cas d'une onde polarisée- s (TE), les composantes tangentielle continues sont E_y et H_x . L'admittance optique est écrite sous la forme suivante:

$$26)\text{-IV} \quad q_k^s = \left(\frac{\epsilon_k}{\mu_k} \right)^{1/2} \cos \theta_k = (\epsilon_k - n_1^2 \sin^2 \theta_1)^{1/2}$$

La matrice de passage M_k s'écrit alors :

$$M_k^s = \begin{bmatrix} \cos \beta_k & (-i \sin \beta_k) / q_k^s \\ -i q_k^s \sin \beta_k & \cos \beta_k \end{bmatrix} \quad (\text{IV-27})$$

Finalement, l'expression générale de la réflectivité R en fonction des coefficients de réflexion de Fresnel et des termes de la matrice résultante M est obtenue par :

$$R_p = |r_p|^2 = \left| \frac{(M_{11}^P + M_{12}^P q_N^P) q_1^P - (M_{21}^P + M_{22}^P q_N^P)}{(M_{11}^P + M_{12}^P q_N^P) q_1^P + (M_{21}^P + M_{22}^P q_N^P)} \right|^2 \quad (IV-28)$$

$$R_s = |r_s|^2 = \left| \frac{(M_{11}^S + M_{12}^S q_N^S) q_1^S - (M_{21}^S + M_{22}^S q_N^S)}{(M_{11}^S + M_{12}^S q_N^S) q_1^S + (M_{21}^S + M_{22}^S q_N^S)} \right|^2 \quad (IV-29)$$

Pour ce système, il y a six couches; par conséquent, $N = 6$. Les indices de réfraction de l'ITO, a-Si:H et Ag ont été obtenus à partir des données expérimentales de Palik [96]. La permittivité diélectrique de la couche de nanocylindres, peut être estimée en utilisant le modèle de Maxwell-Garnett corrigé pour les cylindres.

IV.2.4 ANALYSE ET INTERPRETATION DES RESULTATS

Pour prédire les propriétés électriques de notre dispositif, et en raison de la nature électromagnétique du couplage de plasmons localisées, les modèles FDTD inclus dans les simulateurs optoélectroniques Luminous2D et Luminous3D dans le cadre d'ATLAS sont parfaitement adaptés à l'analyse de ce phénomène pour deux et trois dimensions.

La méthode FDTD peut être utilisée généralement pour modéliser les interactions optiques entre une source optique et un dispositif semiconducteur de la même manière que cela se fait par la méthode "Ray tracing". La différence est que le FDTD résout directement à partir les équations fondamentales d'ondes la propagation du champ électrique et magnétique. L'approche FDTD modélise correctement la propagation des ondes avec des effets de réflexion, diffraction et interférences. En outre, ATLAS est un simulateur puissant de dispositifs semiconducteur qui peut être utilisé avec succès pour les simuler.

Ainsi dans la suite de ce chapitre nous verrons une modélisation physique réalisée en bidimensionnel via le progiciel SILVACO. Il essaie de résoudre numériquement les équations de la physique des semi-conducteurs pour le silicium amorphe en les simplifiant (la mobilité des porteurs, la distribution des impuretés etc.) ou en ne prenant pas en compte certains phénomènes. La validation du modèle sera réalisée par comparaisons des résultants de simulation avec les résultats de la matrice de transfert.

Dans la figure. 4.10.(a), pour évaluer la précision de la méthode numérique, nous comparons les prédictions analytiques avec les résultats numériques pour les spectres de réflectivité. Les calculs ont été exécutés pour le rayonnement solaire AM1.5G à une incidence normale et polarisation TM. La longueur d'onde est dans la plage de 300 à 850 nm, l'épaisseur de la couche métamatériau est $h = 0,4\mu m$, la distance S entre les particules est $0,25\mu m$, et le rayon de nanotiges est $a = 0,05\mu m$.

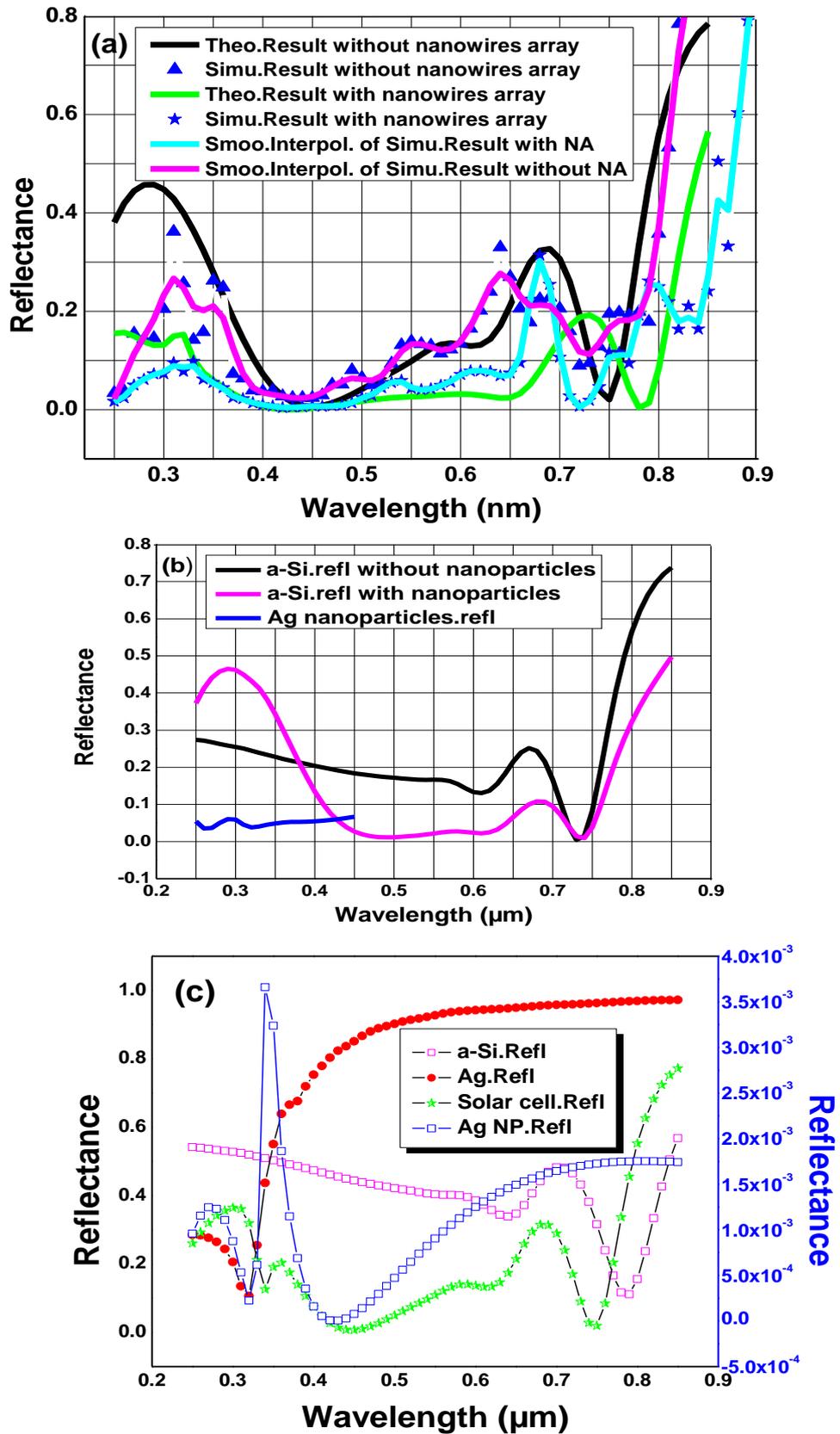


Figure. 4.10.(a) Les résultats analytiques et numériques correspondant à la de réflectivité d'une cellule solaire revêtue de nanoparticules, par rapport à la cellule d'origine. (b) Taux de réflexion spectrale de la couche photo-active a – Si: H et de

nanoparticules d'argent (lignes bleues). (c) Contribution du contact d'Ag et des nanoparticules au taux de réflexion spectrale de la cellule.

Selon la figure. 4.10 (a), les courbes correspondant aux résultats de calcul numérique pour la structure sans couche de nanoparticules assortit presque le spectre analytique de réflectivité obtenu en employant la technique matrice de transfert, suggérant un bon accord entre les deux méthodes de prédiction. Cependant, pour la structure avec des nanoparticules, la courbe de réflectivité calculée numériquement est légèrement décalée vers le bleu par rapport à celle calculée en utilisant le modèle de MG corrigé pour des cylindres.

Cet écart résulte d'une polarisation non homogène des inclusions. Lorsque le rapport d'aspect h/a diminue, le profil de polarisation inhomogène devient plus prononcé. Ceci est dû au fait que le plus grand volume de particules métalliques cylindriques réduit l'amélioration du champ, en décalant le spectre de résonance efficace vers des longues longueurs d'onde et en élargissant la largeur du bande [86,89]. Cette caractéristique indique qu'une précision fiable du modèle MG nécessite une définition correcte de la relation entre la géométrie des particules et des modes de champ locaux.

Sur la même figure, nous illustrons les résultats de simulation concernant la réflectivité de la cellule solaire $a - Si:H$ sans couche de nanoparticules en fonction de longueurs d'onde. Ces résultats sont comparés à celui d'une cellule solaire avec une couche de nanocylindres. Il est clair que les inclusions nanocylindriques sont responsables de la caractéristique d'absorption dans la cellule sur presque tout le spectre solaire étudié (figure. 4.10 (a, c)). Dans le domaine de l'ultraviolet et à des longueurs d'onde proches de la bande interdite du Si, une amélioration significative de l'absorption est clairement observée dans la couche mince et la structures.

En général, l'interaction de la lumière avec des petites ($a = 0,05 \mu m$) nanoparticules d'Ag se fait principalement par le couplage avec les modes dipolaires. La résonance correspondant se produit à presque $0,3 \mu m$, comme le montre la Figure. 4.10 (b). Cette figure montre que, dans la région de résonance, où le SP dipolaire est plus influente, les cellules améliorée par de nanoparticules présentent une réduction d'absorption optique dans la couche photo-active [97,98,99]. Ceci reflète la perte très élevée qui est provoquée par l'excitation du SPs dans ces petites nanoparticules métalliques (les courbes bleues dans la figure. 4.10 (b)).

En dépit de ce fait, la diffusion améliorée de nanoparticules métalliques (également influencée par les plasmons de surface) se produit à des énergies plus faibles [100], améliorant ainsi le piégeage de la lumière à l'intérieur de la couche photo-actif $a - Si:H$. Puisque la majeure partie de l'énergie du rayonnement solaire dans le spectre $AM1.5G$ est concentrée entre 0,55 et 2,5 eV, l'effet positif de l'amélioration de piégeage de la lumière peut compenser l'effet négatif dû à l'absorption plasmonique à l'intérieur des nanoparticules, ce qui donne un gain net positif à partir les effets plasmoniques intégrés sur le spectre solaire [97].

IV.2.4.1 REPONSE SPECTRAL, COURANT ET LES FACTEURS DE QUALITE

La réponse spectrale ou QE (Quantum Efficiency) qui représente, en fonction de la longueur d'onde, le taux de conversion de la lumière incidente en courant électrique collecté est un critère de qualité très importante.

La source de lumière utilisée pour simuler la réponse spectrale est la source de référence AM1.5, la même que celle utilisée pour le courant sous lumière. À chaque longueur d'onde et pour chaque matériau ont été spécifiés les indices de réfraction.

L'effet de la conception plasmonique sur la réponse spectrale quantique externe (EQE) est représenté sur la Figure. 4.12 (a), où la dégradation et l'amélioration de EQE (i.e., photocourant) peuvent être observés. La diminution / augmentation de EQE des cellules solaires plasmoniques résulte de l'interférence destructive / constructive entre le champ diffusé à partir des nanoparticules et celle transmis directement à partir de l'incidence. Cette interférence se produit sur les côtés bleu / rouge de la résonance plasmonique [31]. Une explication récente de ce phénomène suggère que la réduction du photocourant à courtes longueurs d'onde est due aux modes résonnants dans la partie supérieure des particules, alors que l'amélioration à longues longueurs d'onde est dû aux modes délocalisés à l'interface Ag/substrate [97]. Notons également que les spectres EQE dans la figure. 4.12 (a) montrent un premier pic claire à la longueur 480nm d'onde, qui est une conséquence du premier ordre diffracté résultant de la périodicité des nanoparticules.

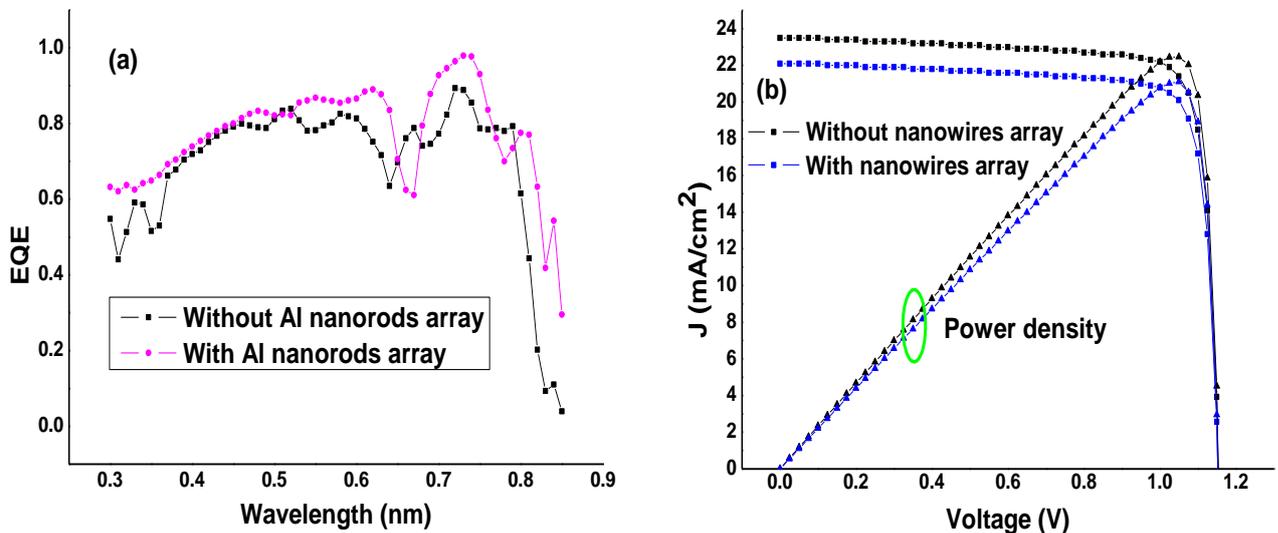


Figure. 4.12.(a). Réponse spectrale quantique externe (EQE) pour la cellule solaire sans (noir) et avec (magenta) la conception plasmonique proposée. (b) courbes I-V et densités de puissance pour la cellule sans (noir) et avec (bleu) la conception plasmonique proposée.

Pour longueurs d'onde plus courtes que 600 nm, les courbes EQE sont similaires pour les cellules plasmonique et de référence. L'amélioration s'est produite près de 660 nm et de 700 nm, où la cellule plasmonique présente une amélioration de 1,2 par rapport à celle de référence. Une résonance secondaire s'est produite près de 800 nm où la cellule plasmonique présente une amélioration de ~ 7,5 par rapport le dispositif de référence.

La figure 4.12 (b) présente les caractéristiques I-V et les densités de puissance de la cellule courante, avec et sans nanoparticules. Les paramètres de performance du dispositif ont été extraits à partir de ces courbes et sont énumérées dans le tableau 1. Ces résultats montrent que, pour la structure avec le réseau de nanocylindre, un taux d'amélioration au-dessus de 7% pourraient être atteints pour J_{sc} , P_{max} , et η . Cependant, ni V_{oc} ni FF n'a montré une amélioration significatif.

Tableau 1. Amélioration des paramètres de performance du dispositif dû à la présence des nanorods cylindriques en Ag.

	J_{sc}	V_{oc}	FF	η
Unité	mA/cm^2	V		%
avec nanorods en Ag	23.53	1.155	0.832	23.6
sans nanorods en Ag	22.13	1.153	0.828	21.9
Amélioration (%)	6.32%	0.17%	0.48%	7.43%

IV.2.4.2 EFFET DE TAILLE DES NANOPARTICULES

Pour optimiser la performance des cellules solaires plasmoniques, il est nécessaire de maximiser la diffusion directe de la lumière à partir des plasmons de surface vers la couche photo-active et de réduire l'absorption de la lumière par les nanoparticules métalliques dans la région maximale du spectre solaire. Ici, nous discuterons comment la dimension de particules influence la performance optique et électrique des cellules solaire plasmoniques. La figure.4.12 montre l'effet du rayon de nanocylindres sur les performances optiques et électriques des cellules solaires plasmonique. Cette figure montre clairement que la cellule solaire plasmonique avec de plus grandes nanoparticules a une absorption plus élevé, en raison de l'absorption parasite faible dans les nanoparticules.

Dans les courbes d'amélioration de l'absorption (figure. 4.12 (a)), deux régions d'interférence (marquées 1 et 2) sont observés autour des longueurs d'onde 300 et 670 nm, respectivement. Le rayon de nanocylindres affecte l'absorption dans ces deux régions. Pour

de plus petites particules, la lumière absorbée par les nanoparticules est dominée par l'absorption, donc l'amélioration de l'absorption est relativement faible (Figure. 4.12 (a)).

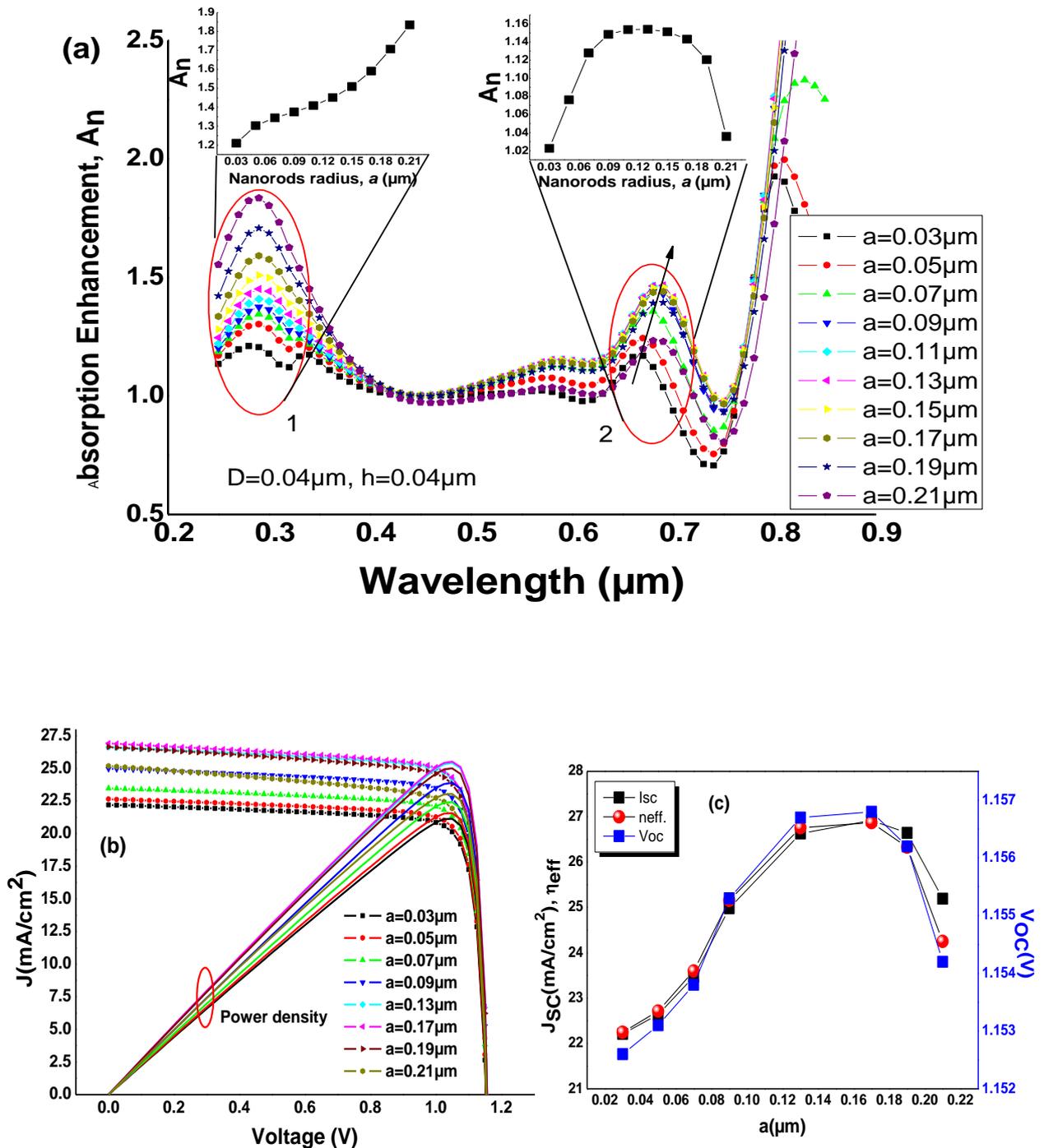


Figure. 4.13. La variation (a), de rapport d'amélioration de l'absorption, A_n , (b) des courbes I-V et de densités de puissance, et (c) des paramètres de performances de cellules solaires, avec les rayons de nanocylindres, a , $S = 0,04 \mu\text{m}$ et $h = 0,04 \mu\text{m}$.

La diffusion commence à dominer lorsque la taille des particules augmente. Dans notre cas, la taille optimale pour une absorption maximale dans le substrat est d'environ de $0,16 \mu m$. Dans la deuxième zone, la diminution de l'amélioration de l'absorption commence de $a = 0,15 \mu m$, par rapport à $0,22 \mu m$ pour la première zone dans laquelle l'effet de plasmons de surface dipolaires sur l'absorption optique est plus important, comme est représenté sur la Fig. 4.11.

Les électrons de conduction de grandes nanoparticules ne peuvent pas se déplacer dans la phase, ce qui conduit à une réduction du champ de dépolarisation au centre des particules, et donc à une réduction de la diffusion [101,102]. L'augmentation de la taille des nanocylindres est accompagnée par l'élargissement et l'amortissement de la bande de résonance de Plasmon de surface suivant une loi en A/a [68], et déplace les pics de résonance de PS vers des longues longueurs d'onde. Les figures 4.13(b) et 4.13(c) présentent les caractéristiques I-V, les densités de puissance, et les paramètres de performance J_{SC} , V_{OC} et η , des cellules correspondantes. Le rayon de nanocylindres a été varié de $0,03$ à $0,21 \mu m$. Les valeurs maximales de J_{SC} , V_{OC} et η ont été obtenus à $a = 0,16 \mu m$. Pour $a = 0,16 \mu m$, J_{SC} et η ont été améliorés par rapport à leurs valeurs pour autres rayons, dû à l'augmentation de l'absorption dans les cellules, comme il est indiqué sur la Figure. 4.13 (a). Notons que généralement V_{OC} et FF de cellules solaires ne dépendent pas des rayons de nanocylindres.

IV.2.4.3 EFFET DE DISTANCE INTER-PARTICULAIRE

La figure 4.14 (a) montre l'amélioration du spectre d'absorption de la cellule avec des réseaux périodiques de nanoparticules cylindriques en Ag de diamètre $D = 70 nm$, pour diverses distances inter-particulaires, S . La force de couplage entre les PSs de nanoparticules métalliques dépend de la distance inter-particules. Le couplage électromagnétique de ces particules devient efficace pour des distances inter-particulaires moins de cinq fois les rayons de particules ($S < 5a$). Cependant, pour les particules rapprochées, le couplage fort provoque un élargissement de la résonance plasmonique et une grande perte non radiatif, ce qui entraîne une faible absorption [101]. A l'autre extrême, la grande distance entre les particules permet de négliger l'effet de nanoparticules et le dispositif devient similaire à celle sans nanoparticules.

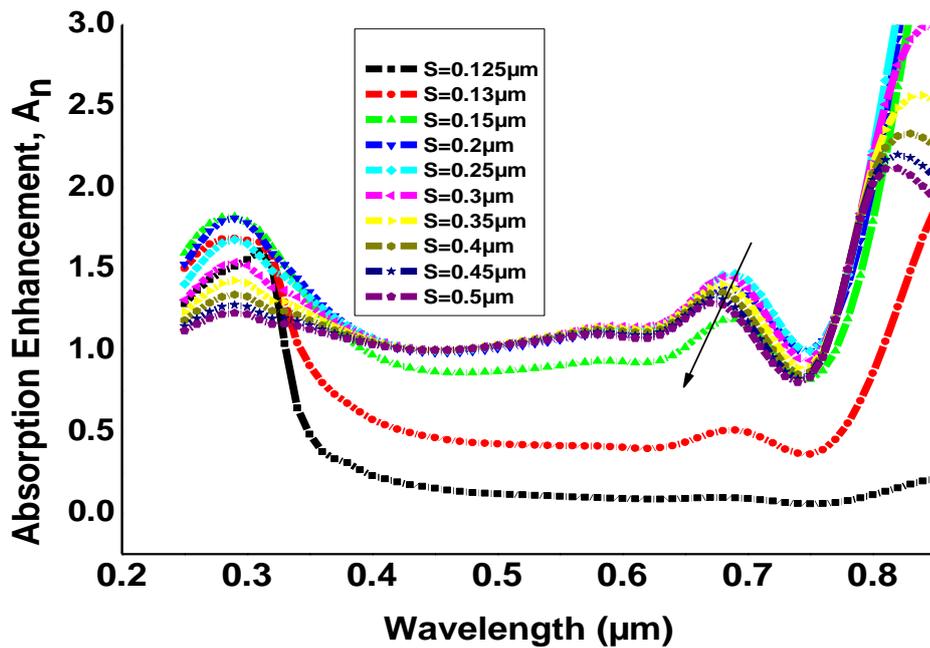


Figure. 4.14. Amélioration d'absorption dans le substrat $a-Si$ avec des nanoparticules cylindriques en Ag, avec $D = 70 \text{ nm}$, à diverses distances inter-particulaires, S .

La figure.4.15(a) démontre l'existence d'un espacement optimal pour une amélioration maximale d'absorption. L'amélioration de l'absorption augmente brusquement, fait une pointe à l'espacement optimal, et puis se délabre lentement avec l'augmentation de la distance entre-particules. Selon la figure. 4.15 (a), la distance optimale entre les particules varie de $\sim 100 \text{ nm}$ à 470 nm pour des nanoparticules avec des tailles allant de 30 nm à 210 nm . La longueur d'onde correspondant à la résonance de PS est décalée vers le bleu en fonction de la distance entre-particules (Figure.4.14). Ce comportement a été rapporté précédemment [101,103] et expliqué à l'aide d'un modèle simple d'interaction dipôle-dipôle.

Figure.4.15(b) représente les paramètres de performance calculés pour la structure correspondante. Ces paramètres indiquent que la diminution de la distance entre les particules améliore P_{max} et η , faisant une pointe à 180 nm avec $P_{max} \sim 24.8 \text{ mW/cm}^2$, ce qui correspond à une amélioration de $\sim 17\%$. L'amélioration provient de l'augmentation en J_{SC} seulement, de 22.19 à 25.67 mA/cm^2 . De plus, la diminution de la distance entre les particules affecte négativement les performances du dispositif, où P_{max} chutant à 19 mW/cm^2 à l'espacement 100 nm , en raison du couplage fort entre les nanocylindres.

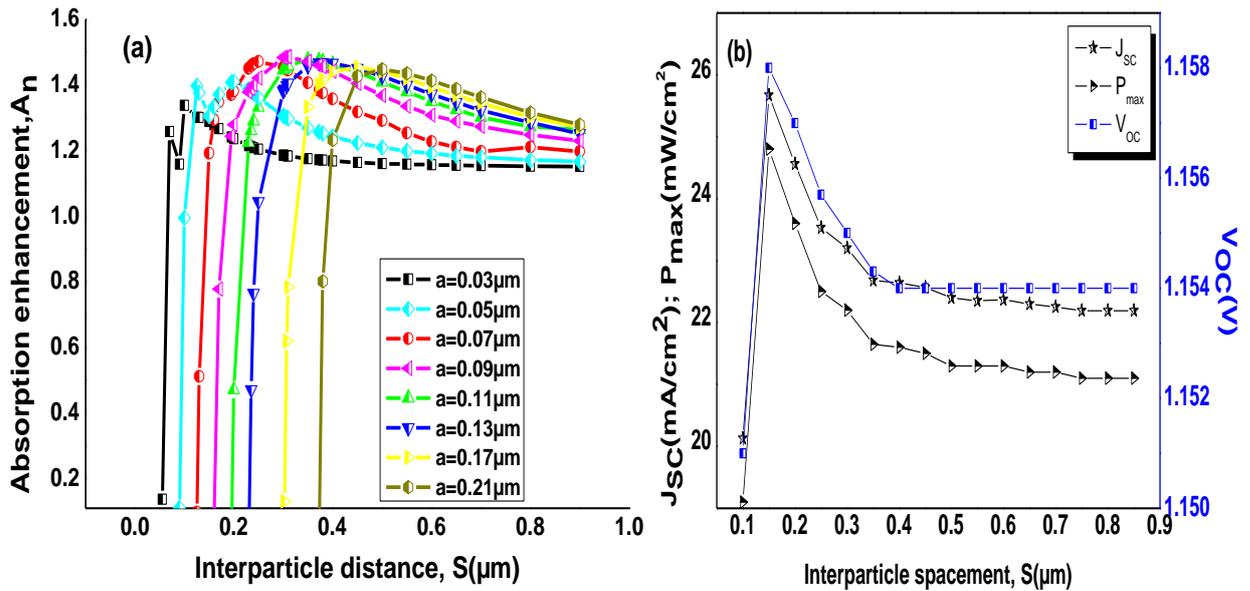


Figure. 4.15 (a) Taux d'amélioration de l'absorption en fonction de la distance entre les particules, pour différentes rayons de nanoparticules (b) variation des paramètres de performance des cellules par rapport à la distance inter-particulaires.

IV.2.4.5 EFFET DE LA COUCHE D'ESPACEMENT ENTRE LA COUCHE DES NANOPARTICULES ET LA COUCHE DE $a - Si$

La longueur d'onde correspondant à la résonance de plasmons de surface d'un nano-objet est également fortement influencée par le milieu diélectrique. La figure .4.16 (a) montre les spectres de réflectance de la structure avec nanocylindres d'Ag sur une couche d'espacement en ITO (ligne noire), en ZnO (ligne verte), et en SiO₂ (ligne rouge). On observe larges bandes de résonance où les longueurs d'onde correspondant à la résonance se situent à $\sim 720 \text{ nm}$ pour SiO₂, $\sim 725 \text{ nm}$ pour l'ITO, et $\sim 730 \text{ nm}$ pour ZnO. Un faible décalage vers le rouge avec une diminution des pics peuvent être observés dans les courbes de réflectance avec l'augmentation de l'indice de réfraction de la couche diélectrique, ce qui entraîne à faible variations dans les paramètres de performance, comme il est représenté sur la figure.4.16 (b), de 24,64 à 24,81 mA/cm² pour J_{SC} avec une amélioration de $\sim 0,7\%$ et de 23,4 à 23,6 mW/cm² pour P_{max} .

La cellule solaire plasmonique avec des nanocylindres déposés directement sur le dessus de la couche $a - Si$ a une absorption sensiblement inférieure à celle avec une couche d'espacement en SiO₂, ITO ou en ZnO. Par rapport à la couche d'espacement SiO₂ et ITO, la couche ZnO a une absorption plus élevée pour $\lambda > 600 \text{ nm}$.

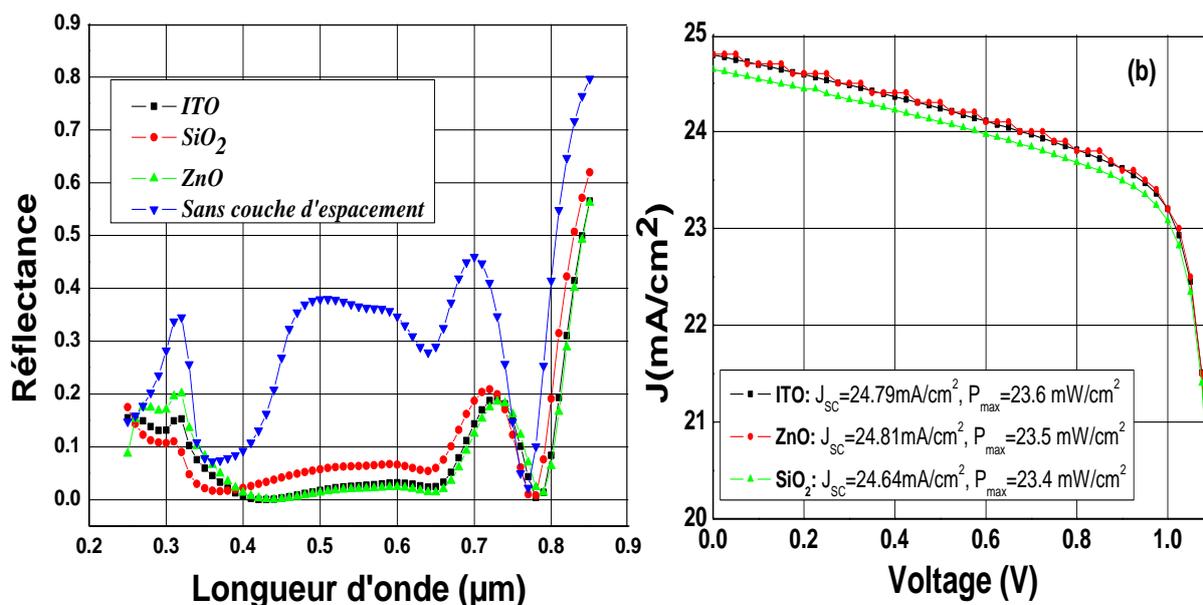


Figure.4.16 (a) Les spectres de réflectance de la structure avec un réseau de nanoparticules cylindriques en Ag ($a = 50 \text{ nm}$, $h = 400 \text{ nm}$, $S = 250 \text{ nm}$) sur une couche de 50 nm d'ITO, SiO₂ et ZnO, (b) Les courbes I-V correspondantes.

L'absorption accrue de la cellule avec une couche d'espacement ZnO par rapport à celle sans couche, avec couche ITO ou couche SiO₂ peut être attribuée à moins de pertes parasites d'absorption dans les nanoparticules d'Ag et la plus forte diffusion par ces nanoparticules.

Bien que la conception plasmonique avec ZnO sous les nanoparticules peut fournir un bon piégeage de la lumière à longues longueurs d'onde ($\lambda > 600 \text{ nm}$), à courtes longueurs d'onde ($\lambda < 600 \text{ nm}$) l'absorption parasite est dominé. Il est bien connu que le remplacement de ZnO par des matériaux plus élevés d'indice de réfraction se déplacera la résonance d'absorption dominé aux longueurs d'onde plus élevées ($\lambda > 600 \text{ nm}$) [36,85,104], ce qui entraîne une perte plus élevée d'absorption dans les nanoparticules et un rendement plus faible de diffusion aux longueurs d'onde (600-800 nm) où le piégeage de la lumière est importante pour les cellules solaires.

La Figure. 4.17 montre la variation de EQE et de paramètres photovoltaïques de la cellule solaires plasmoniques étudié avec les différentes épaisseurs de la couches d'espacement ITO au dessous de la couche de nanoparticules. Quand l'épaisseur est augmenté de 30 à 70 nm, J_{SC} augmente de 24,73 à 25,60 mA/cm², tandis que V_{OC} n'a montré pas une amélioration significative.

La couche épais d'ITO sous la couche de nanoparticules provoque souvent des fissures ou des zones défectueuses dans la couche $a - Si$ et ainsi détériorer le V_{OC} et FF [105,106]. Nous pouvons conclure que la couche d'espacement entre la couche de nanoparticules et la couche $a - Si$ doit être conçu de manière optimale pour fournir une

bonne surface pour éviter la faible diffusion et la forte absorption parasite dans les nanoparticules aux longues longueurs d'onde.

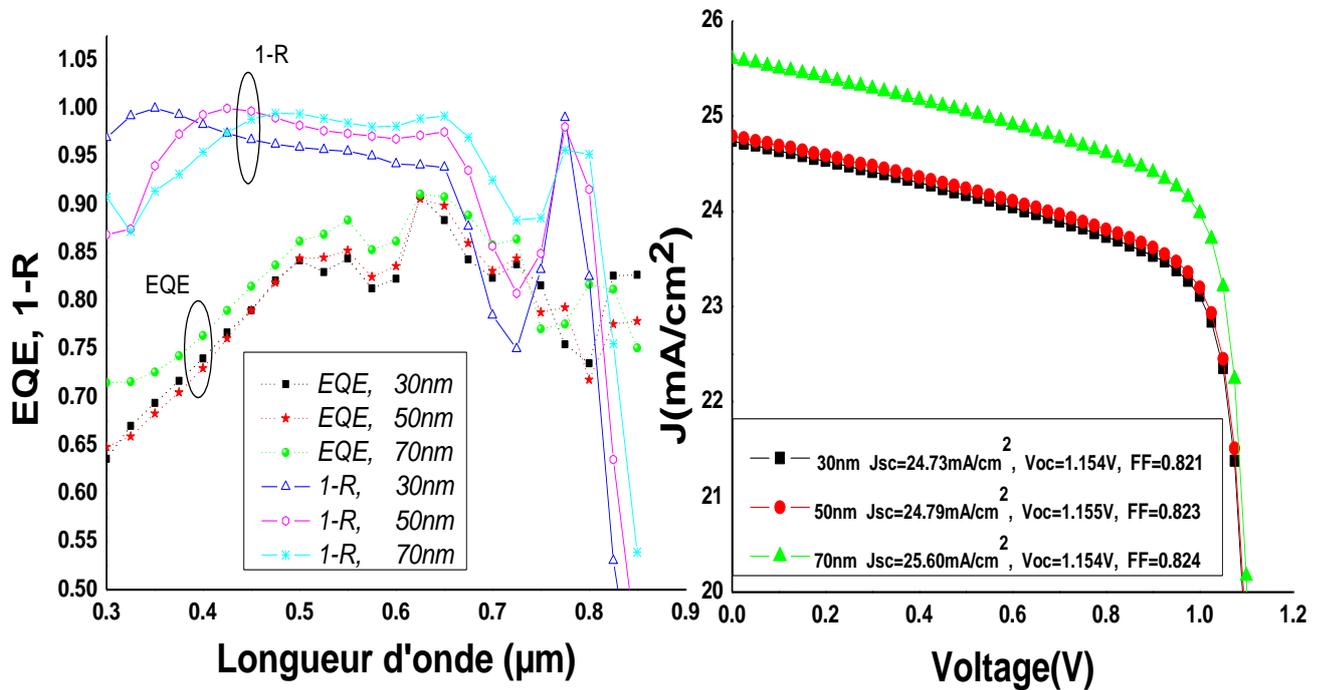


Figure.4.17 (a) Les spectres de réflectance de la structure avec un réseau de nanoparticules cylindriques en Ag ($a = 50 \text{ nm}$, $h = 400 \text{ nm}$, $S = 250 \text{ nm}$) sur une couche d'ITO de 30 nm, 50 nm et 70 nm. (b) Les courbes I-V correspondantes.

CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons analysé les propriétés photovoltaïques des contacts Schottky avec et sans une amélioration plasmonique et nous concluons que:

- ✓ La puissance maximal et très sensible à l'intensité de l'éclairement : lorsque l'éclairement diminue de 100 W/m^2 , la puissance diminue de 10.65%, par contre, cette puissance diminue légèrement avec la température : lorsque la température augmente de 10°C pour un éclairement de 1000 W/m^2 , la puissance diminue de 5.8%.
- ✓ L'abaissement de la température occasionne une amélioration du rendement de conversion.
- ✓ le courant de court-circuit est très sensible à l'éclairement et montre une relation linéaire avec l'intensité tandis que la tension du circuit-ouvert varie très peu avec l'éclairement et diminue légèrement avec la température de façon linéaire,
- ✓ la performance de la structure avec une couche anti reflet augmente presque par 21.28% par rapport à celle sans CAR. Nous avons trouvé aussi que J_{SC} varie avec la variation de l'épaisseur de CAR et prend son valeur maximal à $D = 0.06 \mu\text{m}$.

- ✓ Pour la conception plasmonique, notre structure est supposée qu'est couverte par un réseau périodique de nanocylindres d'Ag où le constant diélectrique de cette couche est calculé d'après le modèle corrigé de Maxwell Garnett et la réflectivité de la structure par la méthode matrice de transfert de N-couche. Les propriétés électriques et optiques de notre dispositif sont simulées en utilisant les modèles FDTD inclus dans les simulateurs optoélectroniques Luminous2D dans le cadre d'ATLAS.
- ✓ Pour évaluer la précision de la méthode numérique, nous avons comparé les prédictions analytiques avec les résultats numériques pour les spectres de réflectivité. suggérant un bon accord entre les deux méthodes pour la structure sans couche de nanoparticules
- ✓ Les nanocylindres montrent une amélioration significative de l'absorption dans la structure due dans notre cas (de petites nanoparticules) au couplage de la lumière avec les modes dipolaires.
- ✓ La réduction du photocourant à courtes longueurs d'onde est due aux modes résonnants dans la partie supérieure des particules, alors que l'amélioration à longues longueurs d'onde est dû aux modes localisés à l'interface Ag/substrat. L'amélioration la plus forte s'est produite près de 660 nm et de 700 nm avec une amélioration de 1,2 par rapport à cellule de référence. Une résonance secondaire dans les courbes EQE s'est produite près de 800 nm avec une amélioration de $\sim 7,5$. Les paramètres de performance du dispositif ont présenté un taux d'amélioration au-dessus de 7% pour J_{sc} , P_{max} , et η .
- ✓ la cellule avec de plus grandes nanoparticules a une absorption plus élevée, en raison de l'absorption parasite faible dans les nanoparticules. Dans notre cas, la taille optimale pour une absorption maximale dans le substrat est d'environ de 0,16 μm .
- ✓ Notre étude démontre l'existence d'un espacement optimal pour une amélioration maximale d'absorption. L'amélioration de l'absorption augmente brusquement, fait une pointe à l'espacement optimal, et puis se délabre lentement avec l'augmentation de la distance entre-particules.
- ✓ les paramètres de performance montrent une faible variation avec la variation de l'indice de réfraction de la couche d'espacement.

CONCLUSION GENERALE

Le travail effectué dans cette thèse apporte une contribution dans les domaines des composants électroniques et des énergies renouvelables. A partir des logiciels TCAD-SILVACO et MATLAB nous avons:

- Modélisé d'une manière fine les propriétés de conduction des structures Schottky et discuté l'intérêt de la protection périphérique à l'empêchement de l'effet d'avalanche à une polarisation inverse.
- Analysé la conception et le fonctionnement d'une cellule solaire Schottky, et étudié les moyens permettant d'améliorer le rendement et la performance de ces cellules à partir de l'augmentation de l'absorption du substrat.

Dans le chapitre I, nous avons étudié le comportement des contacts MS et définissant les paramètres physiques gouvernant ce comportement. Généralement, les contacts MS sont redresseurs si le semiconducteur est de type n et $\phi_m > \phi_s$ ou de type p avec $\phi_m < \phi_s$ et ohmique pour les cas inverse. Cependant, pour certains cas la hauteur de la barrière de potentiel est indépendante de la nature du métal. J.Bardeen en 1947, a montré que ceci était dû à la présence des états de surface existant sur le semi-conducteur. L'échange de charges par le semi-conducteur va donc se faire avec ces états. A.M.Cowley et S.M.Sze, ont proposé une théorie unifiant celle de Schottky et celle de Bardeen. Ils supposent l'existence entre les deux corps d'une couche interfaciale mince d'épaisseur D_i . Kurtin, McGill, et Mead ont assumé que la hauteur de la barrière dépend linéairement du travail de sortie du métal où la pente dépend à son rôle par l'ionocité de liaisons des semi-conducteurs. Heine dans son modèle et au lieu des états de surface souligne le rôle des (MIGS) qui sont des énergies dans le gap fondamental de semi-conducteur, et affaiblissent exponentiellement du côté semi-conducteur de la jonction. Les queues de MIGS peuvent stocker une charge dans le semi-conducteur, à une certaine distance de la surface du métal, comme dans le cas des états de surface. Andrews et Phillips dans leur étude de la chaleur de formation des siliciures ont proposé une pertinence entre les liaisons de la structure à l'interface et la hauteur de barrière. Enfin, l'issue de ce qui sont les paramètres et les mécanismes physiques qui déterminent la valeur des SBH restes ouverts.

Concernant les mécanismes de conduction dans les diodes Schottky, nous avons montré que Les caractéristiques courant-tension d'une diode Schottky sont généralement décrit par l'émission thermoïonique donnée par la relation $J = J_0 \cdot (e^{qV/nkT} - 1)$, Cependant, Pour la plupart des diodes Schottky (Si et les semi-conducteurs III-V), il y a une déviation de l'émission thermoïonique idéale. On constate que cette déviation peut être expliquée par l'effet Schottky, les effets tunnel, le courant de recombinaison dans la région de déplétion, l'effet des états d'interface et de la couche interfaciale.

Dans le chapitre II, nous avons discuté les résultats de simulation concernant les différentes propriétés d'une diode Schottky:

- ✓ Le courant dans les structures Schottky est dû essentiellement aux porteurs majoritaires, le phénomène d'abaissement de barrière est négligeable en polarisation directe essentiellement pour les basses tensions positive et bien visible en forte polarisation inverse.
- ✓ Pour des champs élevés, il faut tenir compte de l'effet tunnel qui peut apparaître dans la jonction. En polarisation directe l'effet tunnel est négligeable quelque soit la concentration du dopage, tandis qu'en polarisation inverse, La diode simulée présente un courant tunnel important devant le courant thermoélectronique.
- ✓ La protection périphérique par plaque de champ peut augmenter significativement la tension de claquage (de 170V pour une diode non isolé à 404.6V pour une diode avec un film d'oxyde d'épaisseur 46.47 nm). Au dessous de cette valeur optimale d'épaisseur d'oxyde, l'avalanche diélectrique domine pour les diélectriques minces. Pour les couches d'oxyde très épais, la plaque de champ est loin du semi-conducteur et donc il n'a pas beaucoup d'influence sur la répartition du champ électrique. Les caractéristiques directes supérieures des diodes protégées par plaque de champ sont attribuées à la formation d'une couche d'accumulation de faible résistivité dans le semiconducteur.
- ✓ lorsque la concentration du dopage de la couche épitaxiale dépasse $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, la tension V_{BR} diminue très rapidement, tandis que l'augmentation de l'épaisseur de cette couche jusqu'à une certaine limite (20 μm pour notre structure) va augmenter la tension de claquage.

Dans le chapitre III, nous avons présenté une brève description des techniques principales permettant de piéger la lumière en se concentrant sur l'utilité des plasmons de surface et l'influence de nanoparticules métalliques sur l'amélioration du champ localisé et le piégeage de la lumière.

Dans le chapitre IV, nous avons analysé les propriétés photovoltaïques des contacts Schottky avec et sans une amélioration plasmonique et nous concluons que:

- ✓ La puissance maximal et très sensible à l'intensité de l'éclairement : lorsque l'éclairement diminue de $100\text{W}/\text{m}^2$, la puissance diminue de 10.65%, L'abaissement de la température occasion une amélioration du rendement de conversion. le courant de court-circuit est très sensible à l'éclairement et montre une relation linéaire avec l'intensité.
- ✓ la performance de la structure avec une couche anti reflet augmente presque par 21.28% par rapport à celle sans CAR. Nous avons trouvé aussi que J_{SC} varie avec la variation de l'épaisseur de CAR et prend son valeur maximal à $D = 0.06\mu\text{m}$.
- ✓ Concernant la conception plasmonique, et pour évaluer la précision de la méthode numérique, nous avons comparé les prédictions analytiques avec les résultats numériques pour les spectres de réflectivité. suggérant un bon accord entre les deux méthodes pour la structure sans couche de nanoparticules
- ✓ Les nanocylindres montrent une amélioration significative de l'absorption dans la structure due dans notre cas (de petites nanoparticules) au couplage de la lumière avec les modes dipolaires.

- ✓ la cellule avec de plus grandes nanoparticules a une absorption plus élevée, en raison de l'absorption parasite faible dans les nanoparticules. Dans notre cas, la taille optimale pour une absorption maximale dans le substrat est d'environ de $0,16 \mu m$.
- ✓ Notre étude démontre l'existence d'un espacement optimal pour une amélioration maximale d'absorption. L'amélioration de l'absorption augmente brusquement, fait une pointe à l'espacement optimal, et puis se délabre lentement avec l'augmentation de la distance entre-particules.
- ✓ les paramètres de performance montrent une faible variation avec la variation de l'indice de réfraction de la couche d'espacement.

ANNEXE A

1- Niveau de Fermi (E_F) et le potentiel chimique (ψ) d'un gaz électronique

♦ Le niveau de Fermi et potentiel chimique sont loin d'être "synonymes".

Le niveau de Fermi permet de décrire la distribution en énergie d'une population d'électrons indépendants (ou quasi-particules) dans un solide. Le niveau de Fermi renvoie à un modèle simple.

♦ Le potentiel chimique est une notion thermodynamique pour traduire l'équilibre thermodynamique d'un système lorsque le nombre de particules varie (le potentiel chimique est constant dans le matériau à l'équilibre). Le concept de potentiel chimique est quand à lui valable pour des particules en interactions et non spécifique à un modèle (classique ou quantique).

Le comportement du gaz électronique quantique à $T \neq 0$ est un problème standard de mécanique statistique, la réponse est donnée par la distribution de Fermi-Dirac.

La distribution de Fermi-Dirac donne la probabilité qu'un niveau électronique d'énergie E soit occupé dans le cas d'un gaz électronique quantique, sans interaction entre particules, et en équilibre thermique. Elle est donnée par [1]:

$$f(E, T) = \frac{1}{1 + \exp\{(E - \psi)/K_B T\}}$$

ψ est le potentiel chimique du gaz électronique, c'est une fonction de la température et déterminé de telle sorte que le nombre de particules reste constant.

A température nulle, seuls les niveaux tels $E_k \leq E_F$ que sont occupés, soit:

$$\begin{cases} f(E_k) = 1 & \text{si } E_k = E(k) < E_F \\ f(E_k) = 0 & \text{si } E_k = E(k) > E_F \end{cases}$$

Lorsque $T \rightarrow 0$ la distribution $f(E)$ est telle que :

$$\begin{cases} \lim f(E) = 1 & \text{si } E < \psi \\ \lim f(E) = 0 & \text{si } E > \psi \end{cases}$$

Il est donc nécessaire que $\lim \psi = E_F$ pour $T \rightarrow 0$

Dans les métaux, et les semiconducteurs, pour des températures inférieures à quelques centaines de degré K, le potentiel chimique ψ reste égal à E_F avec une bonne précision.

2. Quasi-niveaux de Fermi

Dans une jonction PN à semiconducteur dont la une partie est soumise à un rayonnement d'énergie E pénétrant capable de créer des paires électron-trou ($E > E_g$, E_g est le gap du semiconducteur). Loin de la zone éclairée, le semiconducteur est à l'équilibre thermodynamique et la densité des porteurs peut s'écrire en fonction du nombre intrinsèque et du niveau de Fermi par :

$$n_0 = n_i \exp\left\{\frac{(E_F - E_{Fi})}{K_B T}\right\}$$

$$p_0 = n_i \exp\left\{\frac{(E_{Fi} - E_F)}{K_B T}\right\}$$

n_i est la densité des porteurs du semiconducteur intrinsèque.

E_{Fi} est le niveau de Fermi du semiconducteur intrinsèque.

E_F est le niveau de Fermi du semiconducteur dopé à l'équilibre thermodynamique.

En présence d'une perturbation, la loi d'action masse n'est plus valable et la notion de niveau de Fermi nécessite l'équilibre thermodynamique.

Cependant on continue à écrire les relations précédentes en utilisant deux grandeurs mathématiques :

E_{Fn} quasi niveau de Fermi pour les électrons et E_{Fp} quasi niveau de Fermi pour les trous définis par :

$$n = n_i \exp\left\{\frac{(E_{Fn} - E_{Fi})}{K_B T}\right\}$$

$$p = n_i \exp\left\{\frac{(E_{Fi} - E_{Fp})}{K_B T}\right\}$$

Ce qui donne :

$$E_{Fn} = E_{Fi} + K_B T \ln\left(\frac{n}{n_i}\right)$$

$$E_{Fp} = E_{Fi} - K_B T \ln\left(\frac{p}{n_i}\right)$$

Avec : $n \cdot p = (n_i)^2 \cdot \exp\left\{\frac{(E_{Fn} - E_{Fp})}{K_B T}\right\}$

Quand on est à l'équilibre : $E_{Fn} = E_{Fp} = E_F$ et la relation précédente redonne :

$$n_0 p_0 = n_i^2, \quad \text{Donc}$$

♦ Les quasi niveaux de Fermi se confondent avec le niveau de Fermi loin de la zone de charge d'espace éclairée.

♦ Le quasi niveau de Fermi des électrons se décale du côté Ec (niveau d'énergie de conduction) car $E_{Fn} > E_{Fi}$.

♦ Le quasi niveau de Fermi des trous se décale du côté Ev (niveau d'énergie de valence) car $E_{Fp} < E_{Fi}$ c'est-à-dire que le quasi niveau de Fermi des trous descend dans la bande interdite pour se rapprocher du maximum de la bande de valence.

Référence

[1] Thomas BOURDEL, thèse de doctorat, Université Paris 6, 2004, Gaz de Fermi en interaction forte : Du condensat de molécules aux paires de Cooper.

ANNEXE B

1. Présentation du logiciel TCAD-SILVACO

Les simulateurs TCAD (Technology Computer-Aided Design) permettent la modélisation du comportement physique et électrique d'un composant électronique, dans le but d'économiser le temps et le coût de développement, et ainsi de pouvoir envisager et optimiser des solutions pour améliorer les performances des dispositifs. Les simulateurs existants sur le marché (ISE, SYNOPSIS, SILVACO,...) ont le même principe de fonctionnement.

SILVACO (Silicon Valley Corporation) est une société Américaine, « Silvaco International » ayant son siège à Santa Clara en Californie. Elle est un environnement de logiciels qui permet de concevoir et prévoir les performances des dispositifs à semiconducteurs. Cet outil sert à la modélisation des dispositifs à semiconducteurs avant leur fabrication. Il est très utile dans le développement de beaucoup de projets de recherches. Le TCAD-SILVACO inclut de nouveaux modèles physiques qui emploient des méthodes et des algorithmes numériques efficaces, de nouvelles techniques de maillage, l'optimisation des solutions linéaires, ... etc, tout en permettant d'obtenir des résultats de simulation très proches de celles de la pratique. L'avantage majeur de ce type de simulateurs est qu'il donne la possibilité de visualiser des phénomènes physiques difficilement accessibles et donc observables. Sous SILVACO l'ensemble des outils de simulation et des outils interactifs permettant la conception et l'analyse de la plupart des dispositifs semi-conducteurs s'appel VWF (Virtual Wafer Fab) [1,2]. Les composants de base de VWF sont :

1. *Les outils de simulation (VWF core tools).* Ces outils simulent soit leurs processus de fabrication ou soit leurs comportements électriques. Les outils de simulation sont Athena, Atlas et SSuprem3.
2. *Les outils interactifs (VWF interactive tools).* Ces outils sont désignés pour être utilisés en mode interactif dans la construction d'un seul fichier d'entrée. En étant basé sur une interface utilisateur qui est graphique (Graphical User Interface, GUI), le travail de construction du fichier d'entrée devient plus efficient. Les outils interactifs peuvent être utilisés soit en relation avec un ensemble de fichiers, ou comme des composants intégrés dans l'environnant « VWF automation tools ».
3. *Les outils d'automatisation (VWF automation tools).* Ces outils permettent à l'utilisateur d'exécuter sur une grande échelle des études expérimentales pour créer des résultats pour l'analyse statistique suivante. Ces

outils automatiques se servent de : la technologie de base de données répartie et des méthodes de logiciels de transmissions d'interprocessus.

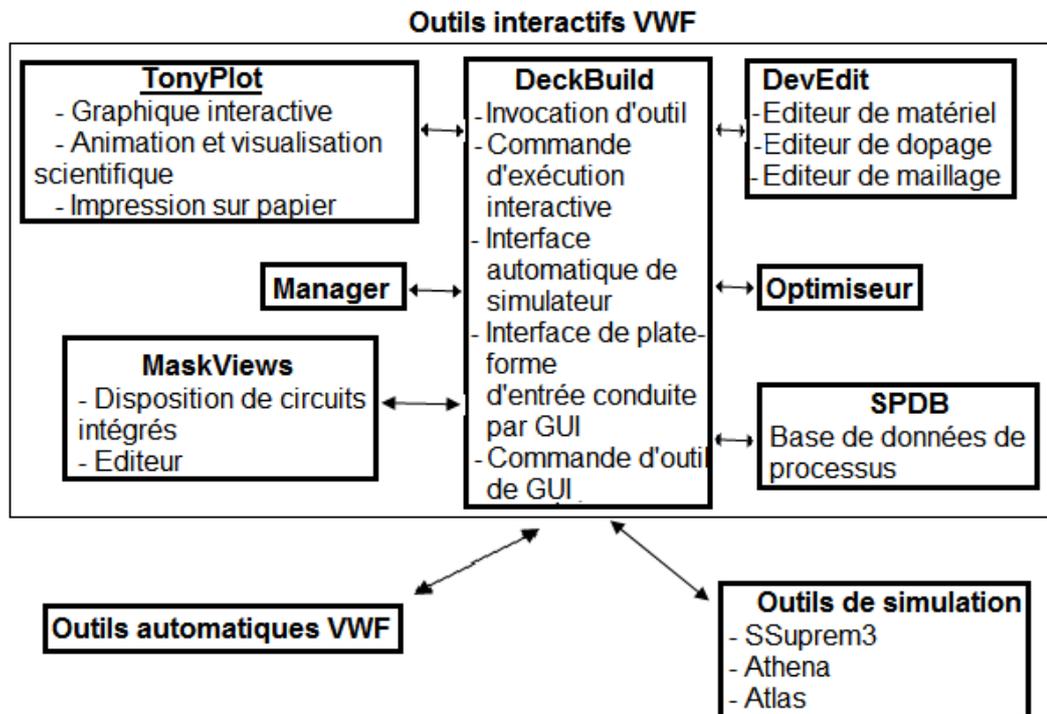


Fig. B.1. Organigramme de la structure VWF.

Les outils interactifs sont:

○ **DECKBUILD**: est l'environnement où est défini le programme de simulation à travers des commandes spécifiques. De multiples simulateurs considérés comme des entrées peuvent être utilisés avec le DECKBUILD: ATHENA, ATLAS, SSUPREM3, sachant que chaque outil de simulation possède son propre langage de programmation.

○ **DevEdit**: outil d'édition de structure, on peut créer des nouvelles structures ou même modifier des structures existantes, on peut définir des maillages ou raffiner les maillages existants.

○ **Manager**: outil de gestion des fichiers utilisés et créés par VWF.

○ **Optimiseur**: outil d'optimisation automatique.

○ **TONYPLOT**: est l'environnement d'outils graphiques où sont visualisés les résultats des simulations, il peut être invoqué par tous les autres outils de Silvaco. Il donne des possibilités complètes pour la visualisation et l'analyse des caractéristiques des sorties. Selon le programme de simulation, TONYPLOT peut

donner des caractéristiques de sortie en une dimension, deux dimensions, ou trois dimensions.

Les outils de simulation sont:

○**ATHENA**: fournit des possibilités générales pour la simulation des processus utilisés dans l'industrie des semiconducteurs: diffusion, oxydation, implantation ionique, gravure, lithographie, procédés de dépôt. Il permet des simulations rapides et précises de toutes les étapes de fabrication utilisées dans l'optoélectronique et dans les composants de puissance. Le programme de simulation des différentes étapes technologiques et les phénomènes physiques s'établit avec le module DECKBUILD, puis la visualisation de la structure de sortie s'effectue avec le module TONYPLOT [3].

○**ATLAS**: simulateur 2D ou 3D de dispositifs semiconducteurs qui permet d'obtenir leur caractéristiques électriques.

1.1. Présentation d'Atlas

La capacité à simuler avec précision un dispositif semi-conducteur est cruciale pour l'industrie et milieu de recherche. L'outil de simulation ATLAS est spécialement conçu pour la modélisation 2D et 3D de composants basés sur la physique des semi conducteurs, en incluant les propriétés électriques, optiques et thermiques. Il possède une bibliothèque regroupant des matériaux prédéfinis comme il permet à l'utilisateur de définir d'autres matériaux propre à leur choix. Il est capable de prédire les caractéristiques électriques de la plupart des composants semiconducteurs en régime (DC), (AC), transitoire ou fréquentiel. En plus du comportement électrique "externe", il fournit des informations sur la distribution interne de variables telles que les concentrations des porteurs, les lignes de courant, le champ électrique ou le potentiel, et des données importantes pour la conception et l'optimisation des procédés technologiques. Ceci est réalisé en résolvant numériquement l'équation de Poisson et les équations de continuité des électrons et des trous en deux dimensions en un nombre fini de points formant le maillage de la structure définie par l'utilisateur ou par le programme.

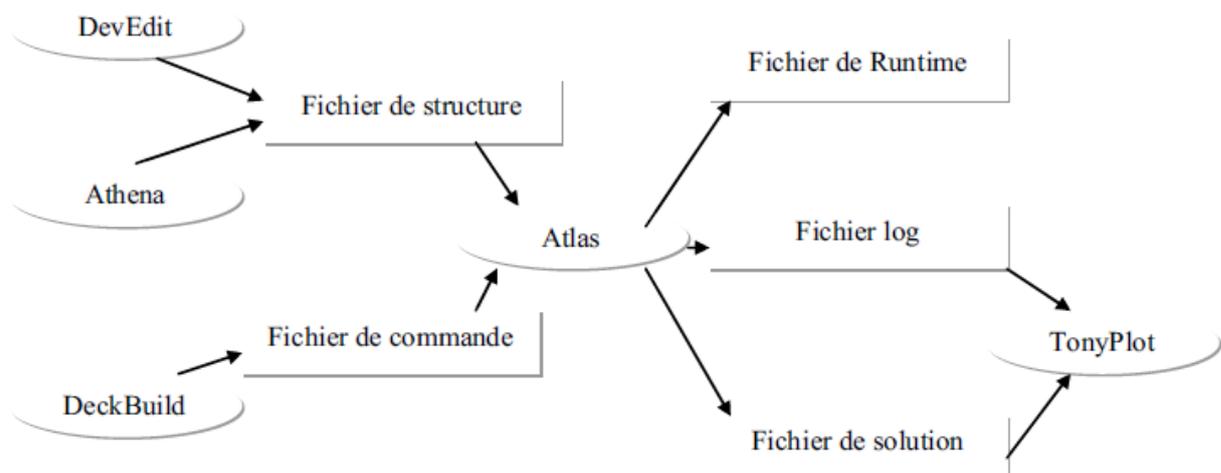


Figure B.2 Entrées et sorties d'Atlas [1].

Le schéma de la Figure. B.2 représente les différents types d'informations qui circulent en entrée et en sortie « d'Atlas ». La plupart des simulations réalisées sous « Atlas » utilisent deux fichiers d'entrée. Le premier fichier est un fichier texte contenant les commandes pour que Atlas s'exécute (représenté par « Fichier de commande »). Le second fichier est un « Fichier de structure » contenant la structure du dispositif qui va être simulée définie dans « Athena » ou « DevEdit ». A la sortie « d'Atlas », nous avons trois types de fichiers. Le premier de ces fichiers est la sortie « Runtime » qui donne la progression, les erreurs et les messages d'avertissements pendant la simulation. Le deuxième type de fichier est le fichier « log » qui stocke toutes les valeurs de tensions et des courants provenant de l'analyse du dispositif simulé (c'est le fichier du comportement électrique). Le troisième fichier de sortie est le « Fichier de solution », ce fichier stocke les données 2D ou 3D concernant les valeurs des variables solutions en un point donné du dispositif (c'est le fichier physique, il contient la structure dans un état particulier). Les deux derniers fichiers sont traités par l'outil de visualisation "TonyPlot".

Dans la figure.B.3 nous voyons représentés les composants qui constituent le simulateur "Atlas". Comme nous remarquons le cœur est la Physique qui contient le modèle mathématique qui fonctionne dans les dispositifs à base de semi-conducteurs. Ainsi les composants développés autour sont :

- o **S-Pisces** : programme de simulation des dispositifs 2D ou 3D, il modélise les caractéristiques électriques des dispositifs à base de silicium en incluant de technologies comme MOS (Metal Oxide Semiconductor), bipolaire, SOI (Silicon On Insulator), EEPROM (Electrically Erasable Programmable Read Only Memory) et dispositifs de puissance. S-Pisces calcule les distributions internes des paramètres physiques et prévoit le comportement électrique des dispositifs à l'état d'équilibre, transitoire ou dans les conditions de courant alternatif de petit signal.

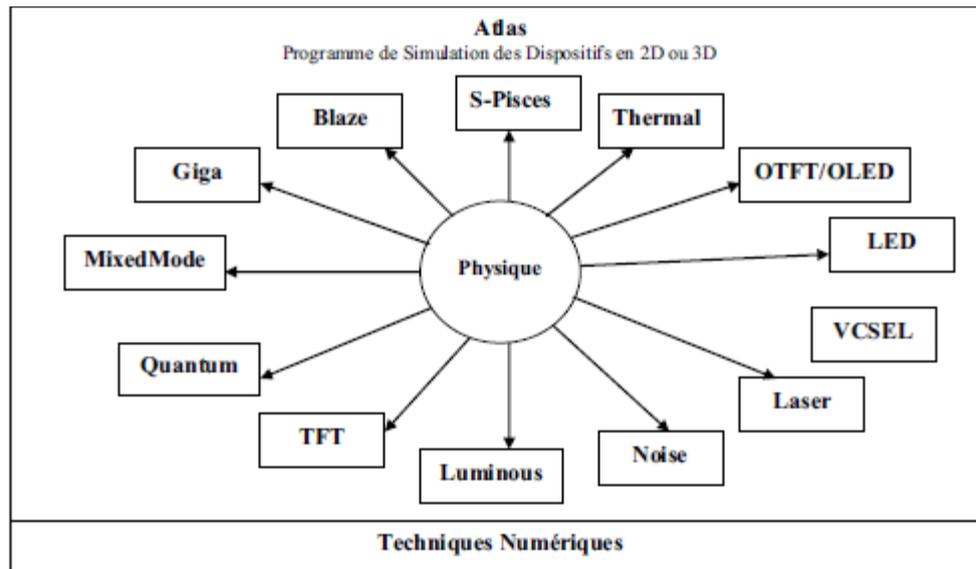


Fig. B.3. Les composants d'Atlas.

o **Blaze** : simulateur des dispositifs 2D ou 3D pour les matériaux III-V, II-VI et des dispositifs avec la structure de bande dépendante de la position (c.-à-d. hétérojonctions). Blaze explique les effets de la structure de bande dépendante de la position par des modifications des équations de transport de charge. Blaze est applicable à une large gamme des dispositifs comprenant : HBT (Heterojonction Bipolar Transistor), HEMT (High Electron Mobility Transistor), LED (Light Emitting Diode), détecteurs photoélectriques d'hétérojonction (piles solaires) et diodes d'hétérojonction.

o **Giga** : prolonge « Atlas » pour expliquer l'écoulement de la chaleur de treillis et les environnements thermiques généraux. Giga met en application le modèle rigoureux thermodynamique de Wachutka du chauffage de treillis, qui explique le chauffage de Joule, le chauffage, et le refroidissement dû à la génération de porteur et à la recombinaison, et des effets Peltier et Thomson. « Giga » explique la dépendance des paramètres du matériau et de transport en fonction de la température de treillis. « Giga » soutient également les spécifications des environnements thermiques généraux en utilisant une combinaison des structures réalistes de radiateur, des impédances thermiques, et des températures ambiantes indiquées. Une application importante de Giga est la simulation des structures de haute puissance comprenant bipolaire, MOS, IGBT (Insulated Gate Bipolar Transistor), et dispositifs de thyristor. Une autre application importante est la simulation des dispositifs électrostatiques de protection de décharge.

o **MixedMode** : simulateur des circuits qui peut inclure des éléments simulés en utilisant la simulation de dispositif (2D ou 3D) et des modèles compacts des circuits. « MixedMode » emploie des algorithmes numériques avancés qui sont efficaces et robustes pour des simulations en courant continu (c.c.), régime transitoire, de petit signal de courant alternatif (c.a.) et de l'analyse de réseau de petits signaux. « MixedMode » est typiquement employé pour simuler des circuits qui contiennent des dispositifs semi-conducteurs modélisés compacts et précis qui n'existent pas ou pour simuler des circuits où les dispositifs qui jouent un rôle critique doivent être modélisés exactement. Les modèles

compacts disponibles et utilisés en général sont de type SPICE. La logique de programmation pour spécifier les circuits est de type SPICE.

- o **Quantum** : simule divers effets d'emprisonnement mécanique de quantum.

- o **TFT** : simule les systèmes des matériaux désordonnés, il ne contient pas de modèles de matériaux donc il faut combiner S-Pisces ou Blaze avec TFT pour simuler ces systèmes de matériaux. « TFT » nous permet de définir une distribution d'énergie des états de défauts dans le gap du matériau semiconducteur. Ceci est nécessaire pour un traitement propre des propriétés électriques des matériaux comme le silicium polycristallin ou le silicium amorphe.

- o **Luminous** : trace des rayons et programme tout usage d'absorption de la lumière. « Luminous » calcul les profils d'intensités optiques dans les dispositifs semi-conducteurs, et convertit ces profils dans des taux de photogénération. Ceci nous permet de simuler des réponses électroniques à des signaux optiques pour une large gamme de détecteurs optiques.

- o **Noise** : simuler le bruit des petits signaux produit par les dispositifs. Le bruit électronique a comme conséquence une dégradation inévitable des performances d'un circuit. Il est important de comprendre les propriétés du bruit pour réduire au minimum son effet.

- o **Laser** : effectue une simulation couplée électrique et optique des lasers à base des semi-conducteurs.

- o **VCSEL** : (Vertical Cavity Surface Emitting Lasers) effectue la simulation électrique, thermique et optique des lasers d'émission surfacique de cavité verticale en utilisant des méthodes entièrement numériques précises, robustes, et fiables et des mailles non uniformes.

- o **LED** : fournit des possibilités générales pour la simulation des dispositifs de diode électroluminescente.

- o **OTFT/OLED** : OTFT simule les caractéristiques des dispositifs réalisés en matériaux organiques (caractéristiques électriques et optiques en courant continu ou transitoire de ceux-ci). OLED simule des densités d'excitation singulière et triplet.

- o **Thermal** : résout l'équation de la chaleur à l'équilibre thermodynamique pour trouver la distribution de la température à l'équilibre en structures 3D planaires et non planaires.

1.1.1. Ordres de commandes d'Atlas

Après la présentation de l'outil de simulation « d'Atlas » de SILVACO TCAD, sa composition interne et son fonctionnement nous allons maintenant présenter l'ordre des commandes propres à la logique de programmation « d'Atlas ». Ainsi il existe cinq groupes de commandes, ces groupes doivent être organisés correctement (ure B.4). Si

l'ordre n'est pas respecté, un message d'erreur apparaît et le programme ne s'exécute pas d'une façon correcte. Par exemple, si les paramètres ou les modèles de matériaux ne sont pas placés dans l'ordre idoine, le simulateur ne les prend pas en compte.

Groupe		Commandes
1. Spécification de la structure	—————	MESH REGION ELECTRODE DOPING
2. Spécification des modèles des matériaux	—————	MATERIAL MODELS CONTACT INTERFACE
3. Sélection de la méthode	—————	METHOD
4. Spécification des solutions	—————	LOG SOLVE LOAD SAVE
5. Analyse des résultats	—————	EXTRACT TONYPLOT

Figure B.4 Ordre des groupes des commandes d'Atlas (Les commandes fondamentales afférentes) [1].

Les commandes fondamentales sont :

- **MESH** : cette commande produit un maillage ou lit un maillage qui a été défini auparavant. L'élément de maille utilisé est le triangle.
- **REGION** : c'est une instruction qui définit une région dans une structure.
- **ELECTRODE** : indique l'endroit et les noms des électrodes dans une structure.
- **DOPING** : indique le type et le profil de dopage.
- **MATERIAL** : associe des paramètres physiques aux matériaux utilisés dans la simulation par exemple : affinité électronique, énergie de gap, la fonction de la densité des états, les vitesses de saturation, les durées de vie des porteurs minoritaires, etc (Il faut faire attention parce que le logiciel a des paramètres de matériau définis par défaut pour les semi-conducteurs standards)
- **MODELS** : Cette instruction permet de faire appel aux modèles physiques existants dans le logiciel, nous pouvons citer comme exemples les modèles de recombinaison Shockley Read Hall (SRH), Auger et les modèles concernant les statistiques des porteurs de Boltzmann, Fermi, etc ...
- **CONTACT** : indique les attributs physiques d'une électrode : anode, cathode, drain, etc ...

○ **INTERFACE** : indique les paramètres d'interface aux frontières de semi-conducteur/isolant, comme exemple, la vitesse de recombinaison en surface et la densité de charge à l'interface.

○ **METHOD** : place les méthodes numériques à employer pour résoudre les équations et les paramètres liés à ces algorithmes. Les méthodes numériques qui peuvent être spécifiées par cette instruction incluent des méthodes telles que celles de Gummel et de Newton.

○ **LOG** : permet à toutes les caractéristiques finales de simulation d'être sauveées dans un fichier (ouvre un fichier de type log (log en minuscule veut dire le type de fichier, LOG en majuscule veut dire la commande dans le programme)). N'importe quel type de donnée, qu'elle soit C.C., transitoire ou C.A., générée par la commande SOLVE est sauveée après la commande LOG (donc les informations sauveées sont de type électrique et elles sont, par exemple, en fonction de la tension de polarisation ou de la source de lumière). Si dans le programme il y a plusieurs commandes LOG, chaque fois le fichier log qui a été ouvert avant est fermé et un nouveau fichier log est ouvert.

○ **SOLVE** : ordonne à Atlas d'exécuter une solution pour un ou plusieurs points de polarisation.

○ **LOAD** : charge des solutions précédentes à partir de fichiers en tant que conditions initiales à d'autres points de polarisation.

○ **SAVE** : sauve toutes les informations d'un point nœud du maillage dans un fichier de sortie (les fichiers de sortie sont de type structure). Les informations sauveées correspondent à un état électrique bien précis.

○ **EXTRACT** : les commandes de ce type sont utilisées pour extraire les valeurs bien précises des paramètres des deux types des fichiers log ou solution.

○ **TONY PLOT** : démarre le programme « TonyPlot » de post processus graphique des donnés. Elle permet de présenter les solutions trouvées pendant la simulation sous forme de graphe.

○ **BEAM** : utilisé pour simuler des courants sous lumière ou des réponses spectrales.

Références

[1] Razvan NEGRU, thèse phd, Ecole polytechnique, France.

[2] source VWF : <http://www.engr.sjsu.edu/dparent/Silvaco/vwf2.pdf>

[3] Bouarabia Fazia, these, université Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou, 2012.

[4] ATLAS User's Manual: Device Simulation Software, 2007. Santa Clara, SILVACO International.

- [5] Simulation Standard, 2008. Simulating Solar Cell Devices Using Silvaco TCAD Tools. *A Journal for Process and Device Engineers*, 18(2): 1-3.
- [6] Micheal, S., A.D. Bates and M.S. Green, 2005. Silvaco Atlas as a solar cell modeling tool. *IEEE.*, pp: 719-721.

ANNEXE C

1. Structure et principe de fonctionnement des cellules photovoltaïques

Les cellules solaires sont des dispositifs à semiconducteur qui convertit l'énergie de la lumière du soleil pour fournir de l'électricité. Cet effet est également connu sous le nom d'effet photovoltaïque qui est la création de tension ou de courant en cas d'exposition de la structure sous lumière. Par conséquent, les cellules solaires sont également appelées cellules photovoltaïques. Elles sont généralement faites du silicium sous ses différentes formes. Elles ne mettent en œuvre aucun fluide et ne contiennent pas de substances corrosives, ni aucune pièce mobile [1,2]. Elles produisent de l'électricité du moment qu'elles sont exposées au rayonnement solaire. Elles ne nécessitent pratiquement aucun entretien; elles ne polluent pas et ne produisent aucun bruit. Les cellules photovoltaïques sont donc la façon la plus sûre et la plus écologique de produire de l'énergie [1,2].

La structure de base d'une cellule photovoltaïque conventionnelle est une jonction PN (figure.C.1) constituée de la manière suivante: un cristal semiconducteur dopé P est recouvert d'une zone mince dopé N (quelques millièmes de mm) [3]. Entre les deux zones se développe une jonction. La zone N est ouverte par une grille métallique qui sert de cathode, tandis qu'une plaque métallique (contact arrière) recouvre l'autre face du cristal et joue le rôle d'anode. L'épaisseur totale du cristal est de l'ordre de millimètre [1,3].

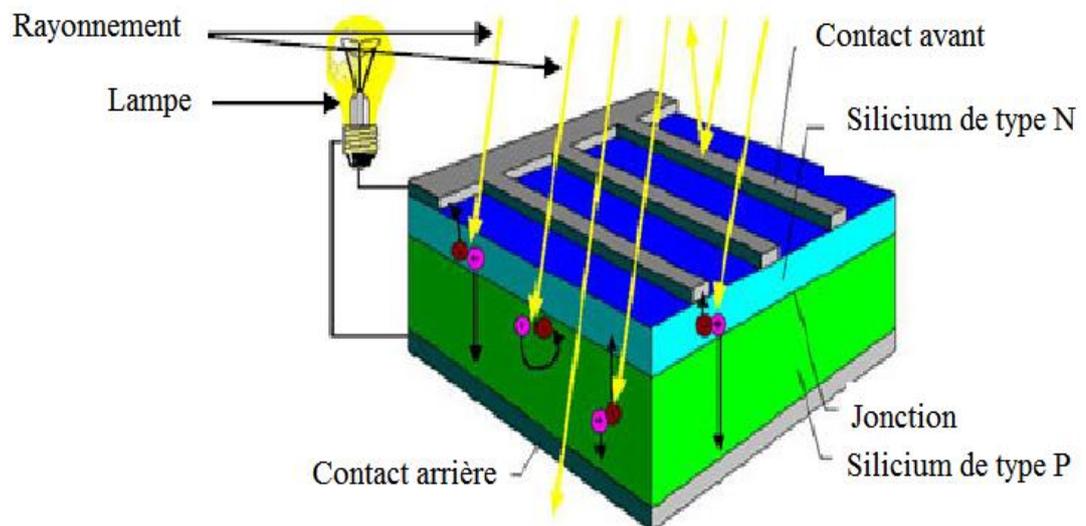


Figure.C.1. Structure d'une cellule photovoltaïque au silicium

Les cellules photovoltaïques peuvent être réalisées à partir des diodes Schottky [4,5]. Réciproquement, le fonctionnement d'une jonction P^+N est analogue à celui d'une diode Schottky [4,5].

Un rayon lumineux qui frappe le dispositif peut pénétrer dans le cristal à travers la grille et provoquer l'apparition d'une tension entre la cathode et l'anode. Le dessus et le dessous de la cellule doivent alors être recouverts de contacts métalliques pour collecter l'électricité générée [1,6].

La cellule photovoltaïque de type PN, absorbe l'énergie lumineuse et la transforme directement en courant électrique. Le principe de fonctionnement de cette cellule fait appel aux propriétés du rayonnement et celle des semiconducteurs [3]. Dans la zone de déplétion de la cellule photovoltaïque [4,1,7], lorsque l'énergie du rayonnement ($h\nu = h\frac{c}{\lambda}$, c : vitesse de la lumière et λ : longueur d'onde) est supérieure à celle associée à la bande interdite (E_g) du semiconducteur, des paires électrons-trous libres sont créées dans cette zone de déplétion [1]. Sous l'effet du champ électrique \vec{E} qui règne dans la zone de déplétion [1,3], ces porteurs libres sont drainés vers les contacts métalliques des régions P et N. Il en résulte alors un courant électrique dans la cellule et une différence de potentiel (de 0.6 à 0.8 Volt) supportée entre les électrodes métalliques de la cellule photovoltaïque.

Pour une cellule solaire réalisée par diode Schottky, le métal doit être suffisamment mince pour permettre à une quantité substantielle de lumière à atteindre le semiconducteur. Il y a trois composants du photocourant. La lumière avec l'énergie $h\nu > q\phi_B$ peut être absorbée dans le métal et excite des trous à travers la barrière pour atteindre le semiconducteur (1 dans la Fig. C.2). La lumière de courte longueur d'onde entrant dans le semiconducteur est absorbée en grande partie dans la région de déplétion (2 dans la Fig. C.2). La lumière de longue longueur d'onde est absorbée dans la zone neutre, et crée paire électron-trou comme dans la jonction p-n; l'électron doit diffuser vers le bord de la zone de déplétion pour être collecter (3 dans la Fig. C.2). En pratique, l'excitation de porteurs du métal vers le semiconducteur contribue moins de 1% du photocourant totale et, peut être donc négligé [8].

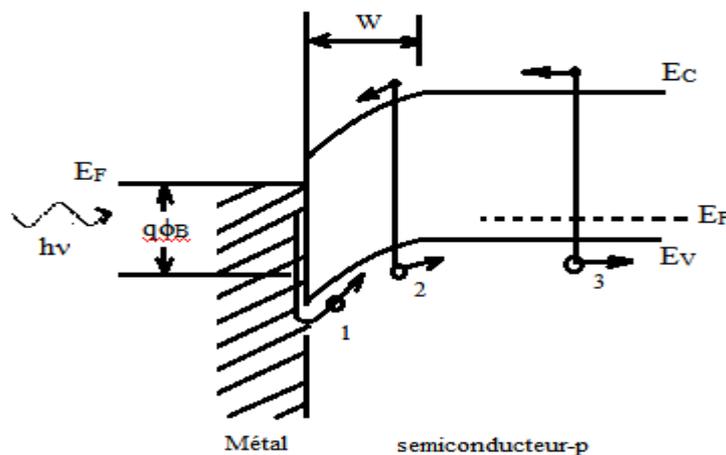


Figure. C.2. Diagramme de bandes énergétique d'une cellule solaire Schottky sous lumière.

Les avantages des barrières Schottky incluent:

- Traitement à basse température, parce qu'aucune diffusion à hautes températures n'est exigée,
- Adaptabilité aux cellules solaires polycristalline et en couche mince,
- Résistance élevée due au champ électrique élevé près de la surface,
- Haut rendement du courant et bonne réponse spectrale, due à la présence d'une région de déplétion.

Les contributions majeures à la réponse spectrale proviennent de la région de déplétion et de la région neutre. Le champ élevé dans la région de déplétion va balayer les porteurs photogénérés avant qu'ils puissent recombiner, conduisant à un photocourant [8]:

$$J_{dr} = qT(\lambda)F(\lambda)[1 - \exp(-\alpha W)] \quad (C.1)$$

Où $T(\lambda)$ est le coefficient de transmission du métal pour une lumière monochromatique de longueur d'onde λ , L_n est la longueur de diffusion. Le photocourant de la région de base est donnée par:

$$J_n = qT(\lambda)F(\lambda)\left[\frac{\alpha L_n}{\alpha L_n + 1}\right] \exp(-\alpha W) \quad (C.2)$$

Le photocourant total est donné par la somme des Eqs.3 et 4:

$$I = I_S \left(e^{\frac{qV}{nkT}} - 1 \right) - I_L \quad (C.3)$$

$$\text{Et} \quad I_S = AA^{**}T^2 \exp(-q\phi_B/kT) \quad (C.4)$$

Dans la figure C.3 on voit la caractéristique I-V, pour un éclaircissement donné. On constate que la puissance fournie dépend du point de fonctionnement et qu'elle passe par un maximum (c'est le point d'intersection entre la caractéristique de la charge et celle de la cellule solaire).

Nous définissons la puissance de référence par:

$$P_0 = I_{SC}V_{OC} \quad (C.5)$$

Où I_{SC} est le courant de court-circuit et V_{OC} la tension de circuit ouverte.

I_C et V_C sont respectivement le courant et la tension fournis à la charge. La pente de la « caractéristique de la charge » (voir figure C.3) représente en fait la valeur de la charge elle-même. Ainsi nous pouvons constater que le point de maximum dépend du choix de la valeur de la charge qui s'avère primordiale. Pour choisir la charge à partir de la caractéristique d'une cellule solaire on calcule le point de puissance maximale de la caractéristique de la cellule solaire, i.e. $(IV)_{\max}$. Ce point de maximum représente le rendement de la cellule solaire, exprimé classiquement en %,

$$\eta = \frac{(IV)_{\max}}{P_{in}} \quad (C.6)$$

Où P_{in} est la puissance de la source de lumière incidente.

Le rapport entre la puissance maximale de la caractéristique de la cellule solaire et la puissance de référence s'appelle facteur de forme :

$$FF = \frac{(IV)_{max}}{I_{sc}V_{oc}} \quad (C.7)$$

Ceci nous permet de voir quelle zone dans l'axe de fonctionnement de la cellule absorbe et convertit mieux une partie du spectre lumineux.

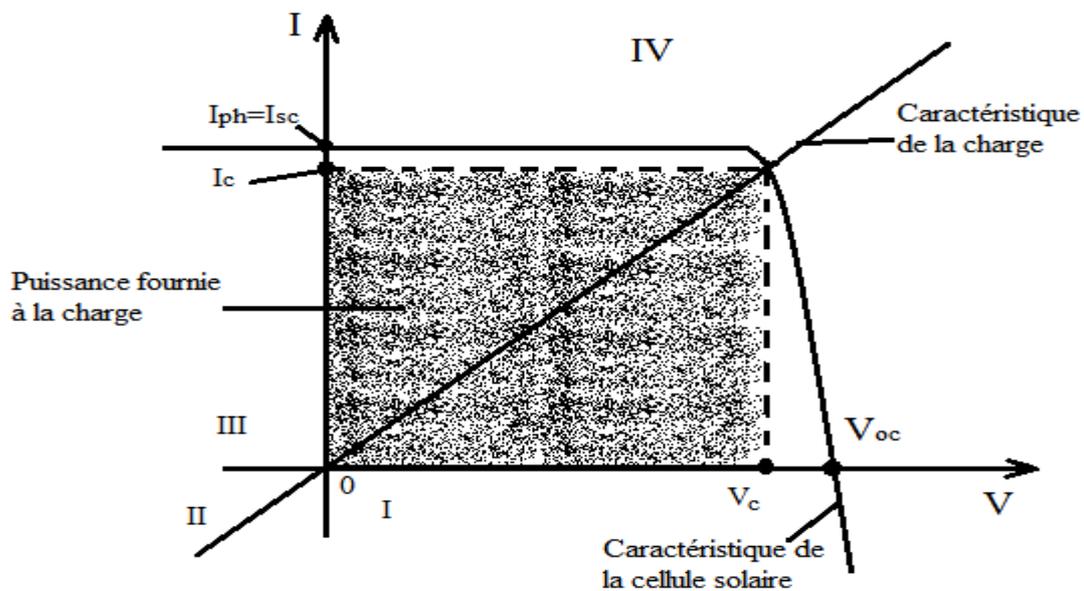
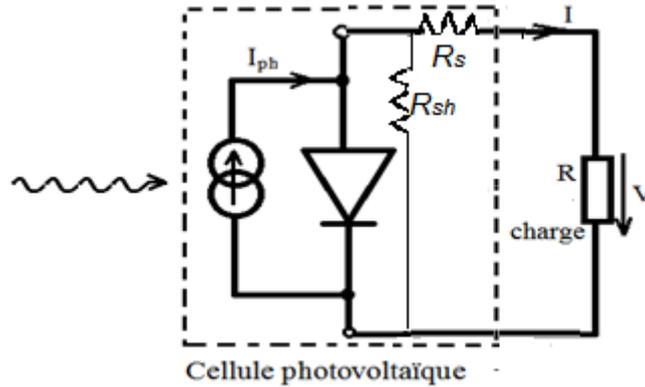


Figure. C.3. Principe de fonctionnement d'une cellule solaire, (l'effet de R_{sh} peut être négligé devant R_s).

Sa valeur maximale est unitaire et on désire ce rapprocher le plus possible de cette valeur pour utiliser au mieux la cellule et en même temps avoir le maximum de rendement. Mais la cellule ne répond pas de manière abrupte à la lumière et sa caractéristique courant-tension présente un coude au point (I_{sc}, V_{oc}) . La caractéristique (I-V) est d'autant plus aplatie au point (I_{sc}, V_{oc}) que le nombre de défauts et de liaisons pendantes est important (comme c'est le cas du silicium amorphe).

Les quatre paramètres, I_{SC} , V_{OC} , η et FF , sont dits paramètres de qualité de la cellule solaire. I_{SC} , V_{OC} représentent la qualité du circuit d'un point de vue sensibilité, FF du point de vue de sa puissance de sortie et η le taux de conversion de la puissance de la lumière incidente. Pour caractériser la cellule solaire on utilise la réponse spectrale (QE , i.e. « quantum efficiency ») qui représente la conversion de la lumière en fonction de la longueur d'onde.

2. Rayonnement solaire

La surface de soleil se comporte comme un corps noir à la température d'environ 5800 K. Ceci conduit un pic d'émission situé à une longueur d'onde de $0.5\mu\text{m}$ pour une puissance d'environ $60\text{MW}/\text{m}^2$, soit un total de $9.5 \times 10^{25}\text{W}$ [9]. En tenant compte de la surface apparente du soleil et de la distance entre celui-ci et la terre, cela conduit à un éclairage moyen dans l'année de $1.36\text{kW}/\text{m}^2\text{hors atmosphère}$.

Cette irradiance est pondérée par divers facteurs à la surface de la terre: absorption par les molécules des différentes couches de l'atmosphère, conditions climatiques, latitude du lieu d'observation et saison. Des gaz comme l'ozone (O_3), pour des longueurs d'ondes inférieures à $0.3\mu\text{m}$, le dioxyde de carbone (CO_2) et la vapeur d'eau (H_2O), pour les infrarouges au dessus de $2\mu\text{m}$, absorbent les énergies proches de leur énergie de liaison, ce qui conduit à des "trous" dans le spectre solaire visible au sol. Par ailleurs, les poussières et aérosols présent dans l'atmosphère conduisent à une absorption répartie quasiment sur toute la gamme spectrale, ce qui conduit à une baisse globale de la puissance incidente. Afin de comparer et d'unifier les performances des cellules photovoltaïques élaborées dans les différents laboratoires du monde, il a été institué la notion d'air mass (AM). Elle quantifie la quantité de puissance absorbée par l'atmosphère en fonction de l'angle θ du soleil par rapport au zénith:

$$AM = \frac{1}{\cos \theta} \quad (\text{C.8})$$

Si le soleil est au zénith du lieu d'observation, $\theta = 0^\circ$, $AM = 1$: la notion utilisée est AM1, AM0 Correspond à l'irradiance hors atmosphère, et est surtout utilisée pour prédire le comportement des cellules pour application spatiales. Le spectre standard le plus étudié est AM1.5G, G signifiant global car il tient compte à la fois des radiations directes et diffuses, par opposition à AM1.5D qui ne tient compte que des directes. AM1.5G donne une irradiance de $970\text{W}/\text{m}^2$, mais a été arrondi à $1\text{kW}/\text{m}^2$. L'intensité I_D reçue à la surface de la terre peut être calculée grâce à la formule empirique suivante [9,10]:

$$I_D = 1.353 \times (0.7^{AM})^{0.678} \quad (\text{C.9})$$

Avec I_D en kW/m^2 , pour une surface perpendiculaire aux rayons incidents. Les spectres AM0 et AM1.5 sont représenté sur la figure C.4.

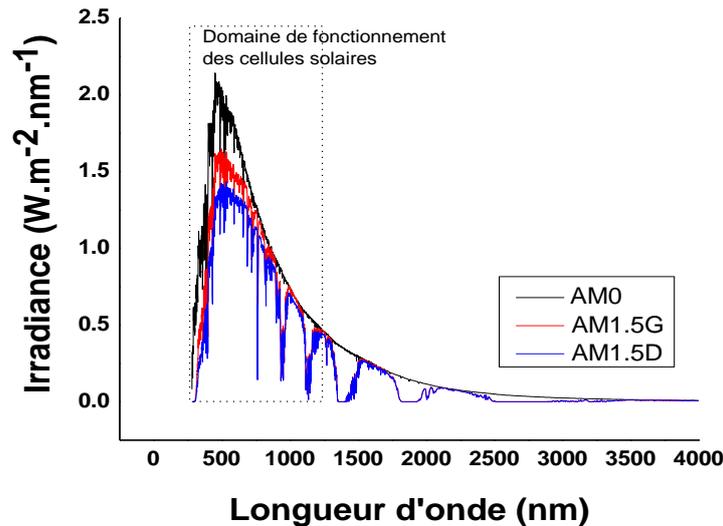


Figure C.4. Représentation graphique des spectres AM0 et AM1.5 d'après [11].

Il apparaît que la partie la plus importante du spectre solaire à la surface de la terre concerne le domaine du visible et du proche infrarouge. Les irradiances définies par le nombre AM ne tiennent toutefois pas compte de la variété des conditions climatiques, et de l'altitude du lieu. La terre présente ainsi de grandes disparités dans la répartition de la puissance solaire: les ensoleillements moyens sur l'année peuvent atteindre $7kWh/m^2/jour$ dans le nord de l'Australie et au Botswana. En Europe occidentale, la puissance se situe autour de $3kWh/m^2/jour$ pour les pays comme l'Espagne, à moins de $1kWh/m^2/jour$ pour le sud de Suède.

3. Matériaux utilisés dans les cellules photovoltaïques

IL y a beaucoup de matériaux qui ont été utilisés pour les cellules solaires et elles sont basées sur différents facteurs:

1. Coefficient d'absorption: C'est l'ability d'un matériau à absorber pour une longueur d'onde particulière; un bon matériau doit avoir une capacité d'absorption élevée sur une large plage de longueurs d'onde.
2. Bande interdite: C'est une propriété très importante car c'est l'énergie minimale nécessaire pour exciter un électron de la bande de valence vers la bande de conduction, elle peut être également défini comme l'énergie minimale nécessaire pour déplacer un électron d'un état lié à un état libre. La Bande interdite est très important car toutes les énergies inférieures à cette bande ne sont pas absorbées. L'énergie des électrons photo-excités situé au dessus de la bande interdite est perdue sous forme de chaleur. La bande interdite préférable pour une cellule solaire à couche unique est définie par le rendement de conversion qui a été décrit par la limite de Shockley Queisser [12,13], où la conversion la plus élevée est celle d'arséniure de gallium qui présente une largeur de bande de 1.424eV.
3. Coût des matériaux: C'est un facteur évident dans n'importe quelle unité de fabrication. Il dépend non seulement sur l'abondance de la matière, mais

sur autres facteurs. La pureté du matériau joue également un rôle dans la performance d'une cellule solaire car les couches semi-conductrices doivent également porter les porteurs libres à travers eux pour être utilisable pour produire de l'électricité, tandis que les impuretés tendent à entraver le transport.

4. Capacité du processus: La fabrication d'une cellule solaire joue un rôle important en son coût final. Les méthodes de production simples sont préférables, ainsi que la reproductibilité en grande surface / volume est aussi une exigence pour la production à faible coût.

Généralement, le silicium est l'élément de base des cellules photovoltaïques, il doit être doté d'une grande pureté [1, 2], quelle que soit sa forme. On peut réaliser une purification d'un barreau de silicium contenant une impureté en déplaçant une zone fondue d'un bout à l'autre du barreau dans laquelle on concentre l'impureté [1].

Récemment, de nouveaux matériaux à base des composés organiques se sont avérés prometteurs dans la technologie des cellules photovoltaïques et dans toute l'électronique. Cependant, ces composés présentent un rendement de conversion très modeste comparativement à la technologie de silicium.

Actuellement, presque tous les générateurs photovoltaïque commercialisés sont à base du silicium sous ces différentes formes (mono-cristallin, poly- cristallin ou amorphe) [1,14]:

- *Silicium mono-cristallin*: c'est un semiconducteur dont les atomes sont ordonnés selon un réseau périodique dans les trois directions. Le rendement de conversion de ce matériau atteint 17% [1],

- *Silicium poly- cristallin*: contrairement au mono- cristallin, le poly-cristallin ou cristallin se trouve à l'état massif a une structure ordonnée mais il est formé de plusieurs monocristaux (grains) dont les réseaux sont désorientés les uns par rapport aux autres [15]. Ce matériau, moins homogène que le silicium mono-cristallin, a de ce fait un rendement énergétique légèrement moins bons (< 14%) [1,14] dans le commerce, mais sa fabrication est très facile.

- *Silicium amorphe*: on trouve également le silicium dans une forme amorphe (non cristallin), c'est à dire avec une structure atomique désordonnée. Sous cette forme, il possède un coefficient d'absorption de la lumière environ mille fois supérieur au silicium cristallin. Une couche de 0.3mm est donc suffisante pour absorber l'essentiel du spectre visible. Avec ce type de matériau peu coûteux [1,14], par rapport aux autres formes de silicium, on a de faibles rendements (5 à 6%) [1] et des problèmes de stabilité apparaissent rapidement quand on l'expose au soleil et aux intempéries (quelques centaines d'heures). Cependant des améliorations ont été effectuées à partir de travaux en laboratoire. Maintenant, les défauts électroniques de ce matériau désordonné peuvent être passivés avec de l'hydrogène pour former le silicium amorphe hydrogéné (a-Si: H) avec de meilleures propriétés électriques. Aujourd'hui, toutes les catégories électroniques de silicium amorphe sont des alliages de silicium et d'hydrogène. L'une des découvertes les plus importantes dans ce domaine était la capacité de doper a-Si: H soit de type n ou de type p par

l'addition de phosphine ou de diborane, respectivement [16,17,18]. Cette capacité à doper l'a-Si a permis la fabrication de composants électroniques et a lancé un grand développement de la matière pour la fabrication de transistors à couches minces, des cellules solaires, etc...

- *Silicium nanocristallin (nc-Si: H)*: appelé également silicium microcristallin (uc-Si), est un matériau entre le c-Si ordonné et l'a-Si: H désordonné. Il contient des cristallites de taille nanométrique (de 10-75nm) dans la matrice d'a-Si: H. Le premier développement a été décrit par S. Marek Vepřek en 1968 et autres groupes [19, 20, 18]. Mais, ces matériaux étaient de mauvaise qualité en raison de dopage involontaire due à l'incorporation d'oxygène pendant la croissance du film, ainsi que le processus de dépôt est lent. Un développement important est réalisé à partir du travail effectué à l'IMT Neuchâtel [21,22] où on atteint un rendement de conversion de 7,7%.

- *Silicium à couche mince*: la technologie à couche mince désigne un type de cellules obtenues par diffusion d'une couche mince de silicium amorphe sur un substrat de verre [2,3]. Le rendement de ces cellules a stagné il y a long temps autour de 17% en laboratoire. Mais des progrès continuent avec le matériau semiconducteur arséniure de gallium, diséléniure de cuivre et d'indium (CIS). Ainsi très récemment, une valeur de rendement de 18% record pour le domaine des couches minces, a été atteinte en laboratoire pour une cellule de petite dimension.

- *Matériaux organiques*: la recherche et développement de cellules solaires à base de matériaux organiques ou des polymères est motivée par les avantages que présentent ces matériaux: faible cout, matière première illimitée, facilité de mise en œuvre, technologie basse température, grandes surfaces, dispositifs souples. Il existe aujourd'hui des cellules photovoltaïques organiques dont le rendement de conversion dépasse la barre des 4% [3].

Références

- [1] A.Aziz, K.KAssmi, F.Olivié, G.Sarrabayrouse, A.Martinez, "Synthèses bibliographiques sur les chaînes photovoltaïques. 1-générateur photovoltaïque (PV)", Rapport LAAS N°04348, 27p, Juin 2004.
- [2] Noble Duncan, et Robert K. Swartman. The Canadian Renewable Energy Guide, Burns town, General Store Publishing House, 1995.
- [3] Abdelhak AZIZ, these phd, UNIVERSITE TOULOUSE III, 2006.
- [4] K.KAssmi, A.Aziz, F.Olivié, J.Ballet, G.Sarrabayrouse, A.Martinez, "Propriétés électriques des diodes Schottky pour des applications photovoltaïques. 1-Logiciel et manuel d'utilisation", Rapport LAAS/CNRS (Toulouse/France) N°03443, 2003.
- [5] K.KAssmi, A.Aziz, F.Olivié, J.Ballet, G.Sarrabayrouse, A.Martinez, "Propriétés électriques des diodes Schottky pour des applications photovoltaïques. 2-Résultats de simulation", Rapport LAAS/CNRS (Toulouse/France) N°03444, 2003.

- [6] Pierre Renaud – Gervais Oreiller. Le soleil source d'énergie. Office fédéral de l'énergie. Berne 1998.
- [7] A.Aziz, K.KAssmi, F.Olivié, J.Ballet, G.Sarrabayrouse, A.Martinez, "Analyse dans l'environnement Orcad-Pspice l'adaptation DC-DC des systèmes photovoltaïques par des convertisseurs de type boost fonctionnant à haut fréquence", Rapport LAAS/CNRS N°05267, 19p. Toulouse/France, juin 2005.
- [8] S.M.Sze, Physique of semiconductor devices, 2nd ed., John Wiley & Sons, New York, 1981.
- [9] Nichiporuk Oleksiy, these phd, l'institut national des sciences appliqués de Lyon, 2005.
- [10] Meinel AB, Meinel MP. Applied Solar Energy. Addison Wesley Publishing Co.; 1976.
- [11] <http://pveducation.org/pvcdrom/appendices/standard-solar-spectra> (consulté le 05/04/2016).
- [12] W. Shockley, and H. J. Queisser, "Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells," Journal of Applied Physics, vol. 32, no. 3, 1961, 1961.
- [13] Sambit Pattnaik, these phd, Iowa State University, 2012.
- [14] Jean-Paul BRAUN. Benjamin FARAGGI. Anne Labouret. Les cellules solaires. Editions technique et scientifique Françaises – Paris – 1996.
- [15] Anne Labouret et Michel Villosz, "énergie solaire photovoltaïque: le manuel du professionnel", Collection EEA Série Electrotechnique, Paris: Dunod, 2003.
- [16] Y. Y. Liang et al., "For the Bright Future-Bulk Heterojunction Polymer Solar Cells with Power Conversion Efficiency of 7.4%," Advanced Materials, vol. 22, no. 20, pp. E135, 2010.
- [17] B. Paci et al., "Photo-degradation and stabilization effects in operating organic photovoltaic devices by joint photo-current and morphological monitoring," Solar Energy Materials and Solar Cells, vol. 92, no. 7, pp. 799-804, Jul, 2008.
- [18] W. E. Spear, G. Willeke, and P. G. Lecomber, "Electronic-properties of microcrystalline silicon prepared in the glow-discharge plasma," Physica B & C, vol. 117, no. MAR, 1983.
- [19] S. Komuro et al., "The dynamics of photoexcited carriers in microcrystalline silicon," Journal of Applied Physics, vol. 56, no. 6, 1984, 1984.
- [20] J. Meier et al., "Complete microcrystalline p-i-n solar-cell - crystalline or amorphous cell behavior," Applied Physics Letters, vol. 65, no. 7, Aug 15, 1994.
- [21] P. Torres et al., "Device grade microcrystalline silicon owing to reduced oxygen contamination," Applied Physics Letters, vol. 69, no. 10, Sep 2, 1996.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] G.A.Boutry., "physique appliqué aux industrie du vide et de l'électronique.," tome 2, fascicule 2, edition Masson, (1971).
- [2] I. Tamm, Phys. Z. Soutjunction, Vol. 1, p.733, (1932).
- [3] Yu.A. Akimov, W.S. Koh, and K. Ostrikov, "Enhancement of optical absorption in thin-film solar cells through the excitation of higher-order nanoparticle plasmon modes", OPTICS EXPRESS, 8 June 2009 / Vol. 17, No. 12.
- [4] R.T.Tung, Mater. Sci. Eng.235 (2001) 1.
- [5] S.M.Sze , Physique of semiconductor devices, 2nd ed., John Wiley & Sons , New York, 1981.
- [6] C. Berthod, Thèse de doctorat, Ecole polytechnique fédérale de Lausanne, 1998.
- [7] Henry Mathieu, Physique des semiconducteurs et des composants électroniques, 5eédition, Dunod, 2004.
- [8] M. J. Turner and E. H. Rhodbrick, Solid-State Electronics Pergamon Press 1968. Vol.11, pp. 291-300.
- [9] A.M.Cowley and S.M.Sze, J. App. Phys., Vol. 36, p. 3212, (1965).
- [10] Z. pang, Thèse de doctorat, Université McMaster, 1997.
- [11] W. Schottky and E. Spenke, Wiss, Verrof, Simmens Werke, Vol. 18, Ed. 67, (1932).
- [12] C. R. Crowell, Solid-State Electronics Pergamon Press 1965. Vol. 8, pp. 395-399.
- [13] C. R. Crowell, Solid-State Electronics Pergamon Press 1969. Vol. 12, pp. 55-59.
- [14] W.Shockley and W.T.Read, JR, Phys. Rev. Vol. 87, N°.5 (1952).
- [15] Sakurai, N.Ishida, "Thin solid films, tsf.12.070 (2007).
- [16] S.H.Dentsu, J.R.Sites, "Thin solid films 5 10 (2006) 320-324.
- [17] A. Kumta, Rusli, Chin-Che Tin, J. Ahn, "Design of field-plate terminated 4H-SiC Schottky diodes using high-k dielectrics", Microelectronics Reliability 46 (2006) 1295–1302.
- [18] Q.Zhang, T.S.Sudarshan, "Lateral current spreading in SiC Schottky diodes using metal overlap edge termination", Solid-State Electronics (2001) 1847-1850.
- [19] A.Lennie, H.Abdullah, Z.M.Shida, M.A.Hannan, world applied sciences journal, 11(7): 786-790, 2010.
- [20] Vibhor Kumar, J. Akhtar, Kulwant Singh, Anup Singh Maan,"Simulation Based Analysis of Temperature Effect on Breakdown Voltage", Journal Of Nano- And Electronic Physics, Vol. 4 No 4, 04009(4pp) (2012) .

- [21] Nichiporuk Oleksiy, these phd, l'institut national des sciences appliqués de Lyon, 2005.
- [22] A. Goetzberger , J. Knobloch, and B. Voss, *Crystalline Silicon Solar Cells*: John Wiley & sons, 1998.
- [23] A. R. Burgers, "How to design optimal metallization patterns for solar cells," *Progress in Photovoltaics*, vol. 7, no. 6, Nov-Dec, 1999.
- [24] Sambit Pattnaik, these phd, Iowa State University, 2012.
- [25] P. Fath, C. Borst et al. Progress in a novel high-throughput mechanical texturization technology for highly efficient multicrystalline silicon solar cells. *Solar En. Mat.&Sol.cells*, 1997, Vol.48, pp. 229-236.
- [26] Fairborz Jahanshah, Rajiv Prinja, John Anderson, Ron Manginell, N. Amin, K. Sopian, and Saleem H. Zaidi, "An Investigation Of Three-Dimensional Texturing In Silicon Solar Cells For Enhanced Optical Absorption", 978-1-4244-1641-7/08/ 2008 IEEE.
- [27] Ming-Hsuan Kao, Ting-Gang Chen, Min-An Tsai, Hsin-Chu Chen, Fang-I Lai, Shou-Yi Kuo, Pei-Chen Yu and Hao-Chung Kuo, "Fabrication and simulation of antireflective nanostructures on c-Si solar cells", ACOFT Presentation , IQEC/CLEO Pacific Rim 2011, 28 August - 1 September 2011, Sydney, Australia.
- [28] DONG LI , BAOWEN ZHOU, GANG LU, "Simulation of Light Trapping in Thin Film Silicon Solar Cell Using TCAD Tools", 978-1-4244-8165-1/11/ 2011 IEEE
- [29] J. Nelson, *The Physics of Solar Cells* (Imperial College Press, London, 2003)
- [30] P. Würfel, *Physics of Solar Cells: From Principles to New Concepts* (Wiley-VCH, Berlin, 2004).
- [31] Wei E. I. Sha, Wallace C. H. Choy, and Weng Cho Chew, "A comprehensive study for the plasmonic thin-film solar cell with periodic structure", 15 March 2010 / Vol. 18, No. 6 / OPTICS EXPRESS.
- [32] M. A. Green, *Third Generation Photovoltaics* (Springer, Berlin, 2003).
- [33] Yu.A. Akimov, W.S. Koh, and K. Ostrikov, "Enhancement of optical absorption in thin-film solar cells through the excitation of higher-order nanoparticle plasmon modes", 8 June 2009 / Vol. 17, No. 12 / OPTICS EXPRESS.
- [34] M. A. Green, *Solar Cells: Operating Principles, Technology and System Applications* (The University of New South Wales, Sydney, 1998).
- [35] J. Müller, B. Rech, J. Springer, and M. Vanecek, "TCO and light trapping in silicon thin film solar cells," *Sol. Energy* 77, 917–930 (2004).
- [36] K. R. Catchpole and A. Polman, "Plasmonic solar cells," *Opt. Express* 16, 21793–21800 (2008).
- [37] M. Westphalen, U. Kreibig, J. Rostalski, H. Lüth, and D. Meissner, "Metal cluster enhanced organic solar cells," *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 61, 97–105 (2000).

- [38] S. W. Tong, C. F. Zhang, C. Y. Jiang, G. Liu, Q. D. Ling, E. T. Kang, D. S. H. Chan, and C. Zhu, "Improvement in the hole collection of polymer solar cells by utilizing gold nanoparticle buffer layer," *Chem. Phys. Lett.* 453, 73–76 (2008).
- [39] H. R. Stuart and D. G. Hall, "Island size effects in nanoparticle-enhanced photodetectors," *Appl. Phys. Lett.* 73, 3815 (1998).
- [40] S. Pillai, K. R. Catchpole, T. Trupke, and M. A. Green, "Surface plasmon enhanced silicon solar cells," *J. Appl. Phys.* 101, 093105 (2007).
- [41] S. S. Kim, S. I. Na, J. Jo, D. Y. Kim, and Y. C. Nah, "Plasmon enhanced performance of organic solar cells using electrodeposited Ag nanoparticles," *Appl. Phys. Lett.* 93, 073307 (2008).
- [42] M. D. Yang, Y. K. Liu, J. L. Shen, C. H. Wu, C. A. Lin, W. H. Chang, H. H. Wang, H. I. Yeh, W. H. Chan, and W. J. Parak, "Improvement of conversion efficiency for multi-junction solar cells by incorporation of Au nanoclusters," *Opt. Express* 16, 15754–15758 (2008).
- [43] N. A. Azarenkov and N. K. Ostrikov, "Surface magnetoplasma waves at the interface between a plasma-like medium and a metal in a Voigt geometry," *Phys. Rep.* 308, 333–428 (1999).
- [44] Yu. A. Akimov, K. Ostrikov, and E. P. Li, "Surface plasmon enhancement of optical absorption in thin-film silicon solar cells," *Plasmonics* 4, 107–113 (2009).
- [45] B. S. Luk'yanchuk, M. I. Tribelsky, Z. B. Wang, Y. Zhou, M. H. Hong, L. P. Shi, and T. C. Chong, "Extraordinary scattering diagram for nanoparticles near plasmon resonance frequencies," *Appl. Phys. A* 89, 259–264 (2007).
- [46] J. P. Kottmann, O. J. F. Martin, D. R. Smith, and S. Schultz, "Spectral response of plasmon resonant nanoparticles with a non-regular shape," *Opt. Express* 6, 213–219 (2000).
- [47] W. B. Ewe, H. S. Chu, and E. P. Li, "Volume integral equation analysis of surface plasmon resonance of nanoparticles," *Opt. Express* 15, 18200–18208 (2007).
- [48] B. J. Soller and D. G. Hall, "Scattering enhancement from an array of interacting dipoles near a planar waveguide," *J. Opt. Soc. Am. B* 19, 2437–2448 (2002).
- [49] K. R. Catchpole and S. Pillai, "Absorption enhancement due to scattering by dipoles into silicon waveguides," *J. Appl. Phys.* 100, 044504 (2006).
- [50] K. P. Catchpole and A. Polman, "Design principles for particle plasmon enhanced solar cells," *Appl. Phys. Lett.* 93, 191113 (2008).
- [51] C. Hägglund, M. Zäch, and B. Kasemo, "Enhanced charge carrier generation in dye sensitized solar cells by nanoparticle plasmons," *Appl. Phys. Lett.* 92, 013113 (2008).
- [52] R.W. Wood. On a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum. *Philos.* 4 (1902) 396–402.

- [53] U. Fano. Zur theorie der intensitätsanomalien der beugung. *Ann. Phys.*, (1938), 32(5) 393–443.
- [54] A. Hessel and A.A. Oliner. A new theory of wood's anomalies on optical gratings. *Applied Optics*, 10 (1965) 1275–1297.
- [55] A. Otto, Excitation of nonradiative surface plasma waves by the method of frustrated total reflection, *Z. Physik*, 216 (1968) 398.
- [56] E. Kretschmann, H. Raether, Radiative decay of non radiative Surface plasmons Excited by light, *Z. Naturforsch*, 23 a(1968) 2135-2136.
- [57] Clément Bonnard, thèse de doctorat, université Claude Bernard - Lyon 1, 2006.
- [58] Malak Kanso, These Phd, École Polytechnique De l'université De Nantes, 2008.
- [59] N.K. Grady, N.J. Halas, P. Nordlander, "Influence of dielectric function properties on the optical response of plasmon resonant metallic nanoparticles", *Chemical Physics Letters* 399 (2004) 167–171.
- [60] Bonacic-Koutecky, V.; Fantucci, P.; Koutecky, J. *Chem. ReV.* 1991, 91, 1035.
- [61] Charlé, K. P.; Schulze, W. *Ber. Bunsen-Ges. Phys. Chem.* 1984, 88, 350.
- [62] Sujit Kumar Ghosh and Tarasankar Pal, "Interparticle Coupling Effect on the Surface Plasmon Resonance of Gold Nanoparticles: From Theory to Applications", *Chem. Rev.* 2007, 107, 4797-4862
- [63] Novotny, L.; Hecht, B. *Principles of Nano-Optics*; Cambridge, U.K., 2006.
- [64] Maier, S. A. *Plasmon: Fundamentals and Applications*; Springer: Berlin, 2007.
- [65] David Lasne, «Microscopie de nano-objets individuels pour la neurobiologie », thèse phd, université bordeaux 1, 2007.
- [66] Hövel, H.; Fritz, S.; Hilger, A.; Kreibig, U.; Vollmer, M. *Phys. ReV. B* 1993, 48, 18178.
- [67] Chumanov, G.; Sokolov, K.; Gregory, B. W.; Cotton, T. M. *J. Phys. Chem.* 1995, 99, 9946.
- [68] Salem Marhaba, these phd, universite claudes bernard - lyon 1
- [69] Daniel, M.-C.; Astruc, D. *Chem. ReV.* 2004, 104, 293.
- [70] Barbar, P. W. Chang, R. K.; Massoudi, H. *Phys. ReV. B* 1983, 27, 7251.
- [71] Hutter, E.; Fendler, J. H. *AdV. Mater.* 2004, 16, 1685.
- [72] Liz-Marzan, L. M. *Mater. Today* 2004, January, 26.
- [73] Turkevich, J. *Gold Bull.* 1985, 18, 86.
- [74] Genzel, L.; Martin, T. P. *Surf. Sci.* 1973, 34, 33.
- [75] Ung, T.; Liz-Marzán, L. M.; Mulvaney, P. *Colloids Surf. A* 2002, 202, 119.

- [76] Kai-Erik Peiponen, Martti O. A. Makinen, Jarkko J. Saarinen and Toshimitsu Asakura, "Dispersion Theory of Liquids Containing Optically Linear and Maxwell Garnett Nanoparticles", optical review Vol. 8, No. 1 (2001) 9-17.
- [77] U Kreibig, "Electronic properties of small silver particles: the optical constants and their temperature dependence", J. Phys. F: Metal Phys, Vol. 4, July, 1974.
- [78] Anne Labouret et Michel Viloz, "énergie solaire photovoltaïque: le manuel du professionnel", Collection EEA Série Electrotechnique, Paris: Dunod, 2003.
- [79] Jean-Paul BRAUN. Benjamin FARAGGI. Anne Labouret. Les cellules solaires. Editions technique et scientifique Françaises – Paris – 1996.
- [80] K.KAssmi, A.Aziz, F.Olivié, J.Ballet, G.Sarrabayrouse, A.Martinez, "Propriétés électriques des diodes Schottky pour des applications photovoltaïques. 2-Résultats de simulation", Rapport LAAS/CNRS (Toulouse/France) N°03444, 2003.
- [81] Abdelhak AZIZ, these phd, UNIVERSITE TOULOUSE III, 2006.
- [82] A.Aziz, K.KAssmi, F.Olivié, G.Sarrabayrouse, A.Martinez, "Synthèses bibliographiques sur les chaines photovoltaïques. 1-générateur photovoltaïque (PV)", Rapport LAAS N°04348, 27p, Juin 2004.
- [83] www.perso.wanadoo.fr/michel.hubin/physique/solide/chap_s8.htm,
- [84] A. Lennie, H. Abdullah, Z.M. Shila and M.A. Hannan, "Modelling and Simulation of SiO₂/Si₃N₄ as Anti-reflecting Coating for Silicon Solar Cell by Using Silvaco Software", World Applied Sciences Journal 11 (7): 786-790, 2010.
- [85] C. F. Bohren and D. F. Huffman, "Absorption and scattering by a sphere," in *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*, New York: John Wiley, 1983, pp. 82-129.
- [86] Anderson O. Silva and João C. W. A. Costa, "Retrieving the Effective Permittivity of an Optical Metamaterial Structured with Metallic Cylindrical Nanorods –An Analytical Approach Based on the Calculation of the Depolarization Field", Journal of Microwaves, Optoelectronics and Electromagnetic Applications, Vol. 13, SI-1, November 2014.
- [87] A. D. Yaghjian, "Electric dyadic Green's functions in the source region," Proc. IEEE, vol. 68, no. 2, 248-263, 1980.
- [88] D. E. Aspnes, "Local-field effects and effective medium theory: a microscopic perspective," Am. J. Phys. Vol. 50, no. 8, 704-709, 1982.
- [89] A. Moroz, "Depolarization fields of spheroidal particles," J. Opt. Soc. Am. B, vol. 26, no. 3, pp. 517-527, 2009.
- [90] Malitson I H. "Interspecimen comparison of the refractive index of fused silica". J Opt Soc Am, 1965, 55: 1205.
- [91] Johnson P B, Christy R W, "Optical constants of the noble metals", Phys Rev B, 1972, 6: 4370.

- [92] U. Kreibig, L. Genzel, " Optical absorption of small metallic particles", Surf. Science, 156 p 678 (1985).
- [93] F. Abeles: "Recherches sur la propagation des ondes electromagnetiques sinusoidales dans les milieux stratifies. Application aux couches minces", Annales de physiques 5 (1950).
- [94] G. J. Kovacs, G. D. Scott, "Optical excitation of surface plasma waves in layered media", Phys. Rev. B 16 (1977).
- [95] Y. Pochi, "Optical waves in layered Media", John Wiley & Sons, New York, (1988).
- [96] Palik E D, "Handbook of optical constants of solids", London: Academic Press Inc, 1985.
- [97] Akimov Y A, Koh W S, Ostrikov K. Enhancement of optical absorption in thin-film solar cells through the excitation of higherorder nanoparticle plasmon modes. Opt Express, 2009, 17(12)
- [98] Pillai S, Catchpole K R, Trupke T, et al. Surface plasmon enhanced silicon solar cells. J Appl Phys, 2007, 101.
- [99] Nakayama K, Tanabe K, Atwater H A, "Plasmonic nanoparticle enhanced light absorption in GaAs solar cells", Appl Phys Lett, 2008, 93: 121904.
- [100] Lim S H, Mar W, Matheu P, et al, "Photocurrent spectroscopy of optical absorption enhancement in silicon photodiodes via scattering from surface plasmon polaritons in gold nanoparticles", J Appl Phys, 2007, 101(10): 104309.
- [101] Y. Premkumar Singh, Anil Kumar, Amit Jain and A. Kapoor, " Enhancement in Optical Absorption of Plasmonic Solar Cells", The Open Renewable Energy Journal, 2013, 6, 1-6.
- [102] Catchpole, K. R.; Polman, A. Plasmonic solar cells. Opt. Express, 2008, 16 (26), 21793-21800.
- [103] Rechberger, W; Hohenau, A; Leitner, A; Krenn, J. R; Lamprecht, B; Aussenegg, F. R, "Optical properties of two interacting gold nanoparticles", *Opt. Commun.*, **2003**, 220, 137-141.
- [104] Hairen Tan, Rudi Santbergen, Guangtao Yang, Arno H. M. Smets, and Miro Zeman, " Combined Optical and Electrical Design of Plasmonic Back Reflector for High-Efficiency Thin-Film Silicon Solar Cells", IEEE Journal Of Photovoltaics, Vol. 3, No. 1, January 2013 53.
- [105] T. Söderström, F. J. Haug, V. Terrazoni-Daudrix, and C. Ballif, "Optimization of amorphous silicon thin film solar cells for flexible photovoltaics," J. Appl. Phys., vol. 103, p. 114509 (8 pp.), 2008.
- [106] H. Sakai, T. Yoshida, T. Hama, and Y. Ichikawa, "Effects of surface morphology of transparent electrode on the open-circuit voltage in a-Si:H solar cells," Jap. J. Appl. Phys., vol. 29, pp. 630–635, 1990.

RESUME DE LA THESE

Les recherches effectuées dans cette thèse portent sur l'étude du comportement des contacts métal-semiconducteur sous obscurité et sous lumière en concentrant sur les contacts dite Schottky.

Dans la partie des contacts sous obscurité, et à partir des logiciels TCAD-SILVACO nous avons modélisé les propriétés de conduction de ces structures. Ensuite, nous avons montré comment la protection périphérique peut augmenter significativement la tension de claquage.

Dans le domaine photovoltaïque, nous avons analysé les propriétés photovoltaïques des contacts Schottky et présenté une technique prometteuse permettant d'améliorer ces propriétés en s'appuyant sur le champ de plasmonique.

Mots clés: contact métal-semiconducteur, diode Schottky, protection périphérique, cellules solaire plasmoniques, théorie de milieu effective.

ملخص

البحث المنجز في هذه الأطروحة يتعلق بدراسة سلوك المتلامسات معدن/ نصف ناقل بدون الضوء وبوجود الضوء مع التركيز على ما يسمى بالاتصال شوتكي.

في الجزء المتعلق بدراسة هذا النوع من الاتصال بدون الضوء، وباستعمال البرنامج TCAD-SILVACO قمنا بنمذجة خصائص التوصيل لهذه المركبات. ثم أظهرنا كيف يمكن لتقنيات الحماية المحيطية أن ترفع بشكل كبير من قيمة الجهد المؤدي للانهييار.

في مجال الطاقة الشمسية، قمنا بتحليل الخصائص الضوئية للاتصال شوتكي وحاولنا تحسين هذه الخصائص باستعمال تقنية واعده تعتمد على مجال البلازمونات.

الكلمات الدلالية: التلامسات معدن/ نصف ناقل ، الصمام شوتكي ، تقنيات الحماية المحيطية، والخلايا الشمسية البلازمونية ، نظرية الوسط الفعال.

Abstract

The research works of my thesis are related to the study of the metal-semiconductor contact behavior in the presence and absence of light with concentrating on the contacts known Schottky.

In the part of contacts under darkness, and by using TCAD-SILVACO software we modelled the conduction properties of these structures. Then, we showed how termination technique can increase significantly the breakdown tension.

In the photovoltaic domain, we analyzed the photovoltaic properties of Schottky contacts and presented a promising technique allowing the improvement of these properties basing on the field of plasmonic to trap the light and increase the absorption in the cells.

Key words: metal-semiconductor contact, Schottky diode, termination technique, plasmonic solar cells, effective medium theory.