



République Algérienne Démocratique et Populaire

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université de LarbiTébessi–Tébessa-

Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie

Département : Sciences de la matière

N° d'ordre :

Série :



Thèse

Présentée en vue de l'obtention du diplôme de

Doctorat en sciences

Option : Physique des matériaux

Thème:

***Etude, analyse et optimisation des propriétés
des matériaux à couches minces pour
les applications photovoltaïques.***

Présenté par:
Zerfaoui Hana

Devant le jury:

Abdelkader Hafdallah	MCA	U. Tébessa	Président
Djalel Dib	Professeur	U. Tébessa	Rapporteur
SouhilaZouai	MCA	U. Tébessa	Examinateur
Djamil Rechem	Professeur	U.O.E.B	Examinateur
Nacer Hebbir	MCA	U.O.E.B	Examinateur

Date de soutenance : 17/09/2020

Résumé :

Ce travail de thèse a pour objectif d'étudier la possibilité d'appliquer dans la technologie photovoltaïque un matériau semi-conducteur binaire comportant le Silicium comme étant le semi-conducteur le plus répandu dans la technologie des cellules solaires.

De plus, l'étude est focalisée sur un composant binaire silicium-carbone en commençant par la prospection fondamentale des propriétés structurelles et électronique de SiC sous le code Wien2k,

Une simulation numérique avec SCAPS-1D de deux formes de PN et PiN à base de SiC et de 3C-SiC plus précisément présentait un procédé adéquat pour le choix du matériau le plus approprié comme couche transparente avec ce matériau et permettant ainsi d'avoir un rendement meilleur de cette cellule photovoltaïque qui dépasse les 20%.

L'étude de certains paramètres jouant un rôle majeur dans l'amélioration du rendement de la cellule tel que la température et les résistances internes est très importante dans la recherche de la performance de la cellule.

Le carbure de Silicium contient un conducteur important et largement utilisé non seulement grâce à ses propriétés physiques mais aussi à celles photovoltaïques qui peuvent être exploitées dans la fabrication des cellules dans le cadre du développement des matériaux semi-conducteurs au service de la technologie photovoltaïque.

En outre, plusieurs facteurs ont un effet très significatif sur le rendement des cellules étudiées tels que, la concentration du dopage dont une partie a été lui consacré dans ce travail de thèse.

Mots-clés : 3C-SiC, cellule solaire, Wien2K, SCAPS-1D.

Abstract:

The aim of this thesis is to investigate the possibility of applying a binary semiconductor material in photovoltaic technology, with silicon being the most successful semiconductor in solar cell technology. In addition, the study focuses on a silicon-carbon binary component starting with the fundamental exploration of the structural and electronic properties of SiC by the Wien2k code.

A numerical simulation with SCAPS-1D of two forms of PN and SiC-based PiN and of 3C-SiC more precisely presented a suitable method for the choice of the most suitable material as a transparent layer with this material and thus allowing a yield best of this photovoltaic cell that exceeds 20%.

The study of certain factors that play an important role in improving cell performance such as temperature and internal resistance is very important in the search for cell performance.

Silicon carbide contains a significant and widely used conductor due to not only its physical properties but its photovoltaic properties that can be exploited in the manufacture of cells as part of the development of semiconductor materials in the service of photovoltaic technology.

Several factors have a very significant effect on the performance of the cells studied, such as the concentration of doping, part of which was devoted to him in this thesis work

Keywords: 3C-SiC, cell solar, Wien2K, SCAPS-1D.

ملخص:

يهدف هذا العمل إلى دراسة إمكانية تطبيق مادة أشباه الموصلات الثنائية التي تضم احد اهم أنواع أشباه الموصلات الأكثر استخدامًا في التطبيقات التكنولوجية خاصة التطبيقات الفوتوفولطية وهي السيليوم.

بالإضافة إلى ذلك ، تركز الدراسة على إمكانية استخدام التطبيقات الضوئية (الخلايا الشمسية) لمكون ثنائي السيليكون مع الكربون فتبدأ بدراسة بعض الخواص الفيزيائية اهمها الهيكلية والالكترونية ل 3C-SiC بالاعتماد على المحاكاة ب Wien2K ثم اختيار المادة الأكثر ملاءمة كطبقة شفافة مناسبة مع هذه المادة من أجل الحصول على أفضل أداء لهذه الخلية كخلايا ضوئية من خلال محاكاة رقمية تعتمد على برنامج SCAPS-1D واستخدام شكلين من أشكال الخلايا PiN و PN المستندة إلى 3C-SiC بشكل أكثر دقة.

أظهرت المحاكاة باستخدام SCAPS-1D أن Sic لديه القدرة على تطبيقه كمادة أشباه الموصلات في تركيب الخلايا الشمسية ذات العائد أكبر من 20٪.

دراسة بعض العوامل التي تلعب دورًا مهمًا في تحسين أداء الخلية مثل درجة الحرارة والمقاومة الداخلية مهمة جدًا في أداء الخلية وكثافة الضوء ، بالإضافة إلى عدة عوامل يكون لها تأثير كبير على أداء الخلايا المدروسة ، مثل: تركيز التطعيم وهذا يمكن أن يكون موضوع مزيد من الدراسات والبحوث.

كربير السيليكون يعتبر نصف موصل مهم يستخدم على نطاق واسع ليس فقط بسبب خواصه الفيزيائية المتعددة ولكن يمكن استغلال خصائصه الضوئية في تصنيع وتركيب الخلايا كجزء من تطوير مواد أشباه الموصلات في خدمة تكنولوجيا الخلايا الشمسية التي تعتبر العنصر الإلكتروني الرئيسي في تكنولوجيا الطاقة المتجددة والذي يعد أهم محور للبحث العلمي حول تطوير مصادر الطاقة في الوقت الحالي.

الكلمات المفتاحية: 3C-SiC, الخلايا الشمسية, Wien2K, SCAPS-1D ,

Remerciements

Allah soit loué pour m'avoir aidé à achever ma thèse de doctorat après un dur et long parcours.

Je remercie mes parents de m'avoir soutenu tout au long de mon ce chemin.

Mes vifs remerciements à mon encadreur Professeur Dib Djalel pour m'avoir accompagné, me bien guidé et me fait confiance pour élaborer ce travail de doctorat .

Toutes mes sincères remerciements aux membres du Jury qui ont accepté d'examiner et évaluer mon travail : Dr Hafdhallah Abdelkader, Pr Djamil Rechem, Dr SouhilaZouai et Dr Nacer Hebbir .

Je voudrais également remercier le Dr Buraq al-Saadi, de l'Iraq, de l'Université de Bagdad, que j'ai rencontré par hasard lors de la Conférence de Beyrouth 2016. M. pour son soutien ses conseils, et son encouragement incessant, il m'a honoré en partageant avec moi la publication d'une partie de mon travail de recherche.

Je remercie également le Dr. Larbi Seddik, un chercheur à l'unité de recherche de Ghardaia, qui m'a soutenue durant ma courte période de formation en juin 2014. Sans oublier les efforts du professeur Ben Yeloul Kamal, professeur de recherche à l'unité de recherche de Ghardaia, qui nous a accompagnés pendant le stage grâce à son énorme expérience.

Je tiens à remercier Dr Belghit Rafik de l'université de Annaba pour son soutien et son aide.

Dédicace

Je dédie ce travail à :

Mon cher père et ma chère mère

Mes deux frères Houcem Eddine et Chiheb Eddine

Mes sœurs Sabrina et Chadia

Ma sœur Sawsan et son mari Dr Belarbi Lakhdar

Mes amies et toutes les personnes qui m'aiment

Tableau des matières

	Remerciements	
	Dédicace	
	Introduction générale	14
	Chapitre I: La cellule solaire, Etat de l'Art	
I.1.	Introduction	17
I.2.	L'énergie solaire	17
I.3.	La conversion photovoltaïque	18
I.4.	Les semi-conducteurs	19
I.4.1.	Les différents types de semi-conducteurs	21
I.4.1.1.	Type N	21
I.4.1.2.	Type P	21
I.4.2.	La jonction PN	21
I.4.3	La recombinaison	22
I.4.3.1	Les types de recombinaisons	22
I.4.3.1.1.	Recombinaison radiative "bande à bande"	22
I.4.3.1.2.	Recombinaison indirecte ou assisté par piège	23
I.4.3.1.3.	Recombinaison Auger	23
I.4.3.1.4.	Recombinaison superficielle	23
I.5.	L'effet photovoltaïque	23
I.6.	Le principe de fonctionnement	24
I.6.1	Historique	25
I.6.2.	Les types des cellules	26
I. 6.2.1	Les cellules solaires à colorant	27
I. 6.2.2.	Les cellules solaires organiques	27
I.6.2.3	Les cellules solaires pérovskite	28
I. 6.2.4	Les cellules solaires polymère	28
I.6.2.5.	Les cellules solaires à point quantiques	28
I. 6.2.6	Les cellules solaires à nano fils	28
I. 6.3.	le principe de fonctionnement et d'une cellule solaire	29
I.6.4.	les paramètres photovoltaïques	30
I.6.4.1.	La densité du courant de court-circuit J_{sc}	31
I.6.4.2.	La tension en circuit ouvert V_{co}	31
I.6.4.3.	le facteur de forme FF(facteur des pertes)	32
I.6.4.4	Le rendement de conversion η	32
I.6.4.5.	Le rendement quantique QE	33
I.6.5.	Caractérisation (I-V) dans le cas idéal	33
I.6.6.	Les types des pertes	33
	Conclusion	34

Chapitre II : Propriétés du matériau SiC, Modélisation et Outils de simulation

II.1.	Introduction	36
II.2.	les propriétés générales de carbure de Silicium SiC	36
II.2.1	Les propriétés structurales du matériau SiC	37
II.2.2	Propriétés électroniques	38
II.3.	Les critères de choix du matériau SiC pour les applications photovoltaïque	38
II.3.1	Domaine d'application du carbure de silicium SiC	39
II.4.	Outils de simulation	40
II.4. 1.	Codewien2k:	40
II.4.1.1	Equation de Schrodinger :	40
II.4.1.2	Approximation de Born-Oppenheimer:	41
II.4.1.3	Approximation de Hartree-Fock:	42
II.4.1.4	Théorie de la densité fonctionnelle (DFT)	43
II.4.1 .5.	Théorèmes de Hohenberg et Khon	44
II.4.1.6	Les équations de Kohn-Sham.	44
II.4 .1.7	Approximation de la densité locale(LDA)	46
II.4.1.8	Approximation du gradient généralisé (GGA):	47
II.4.1.9	Approximation MBJ	48
II.4.1.10	La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW)	48
II.4.1.11	Principe de la méthode FP-LAPW :	50
II.4.1.12	Les rôles des énergies de linéarisation (EI):	51
II.4.1.13	La base LAPW avec les orbitales locales (LAPW+LO)	51
II.4.1.14	Le concept de la méthode FP-LAPW :	52
II.4.1.15	code Wien2k	53
II.5.	Modélisation et simulation numérique des cellules solaires	54
II.5.1	Modèle mathématique de la cellule solaire	55
II.5.1.1	Les équations de base du semi-conducteur	56
II.5.1.1.1	Équations de densité de courant	56
II.5.1.1.2	l'équation de continuité	56
II 5.1.1.3	l'équation de poisson	57
II.5.2	Modèle physique	57
II.5.2.1	Niveaux de vrac profond (Deepbulklevels)	57
II.5.2.2	Etats d'interface et discontinuités de bande	57
II.5.3.	Présentation de SCAPS	58
II.5.4	méthoded'Utilisation du SCAPS:	59
	Conclusion	65

Chapitre III	Cellules à base 3C-SiC, Etude et Applications	
	Introduction :	67
III.1.	L'étude des propriétés structurales et électroniques de 3C-SiC et 4H-SiC	67
III.1.1	Optimisations et propriétés structurale.	67
III.1.2	Les Propriétés électroniques	69
III.2.	La simulation numérique de cellule solaire avec le SCAPS-1D	73
III.2.1	L'Etude de l'effet photovoltaïque d'homo-jonction PN à base de 3C-SiC simulé par SCAPS-1D	73
III.2.2	Choix de type de matériau de la couche antireflet pour une cellule solaire à base de 3C-SiC.	75
III.2.3	Les facteurs technologiques limitant le rendement	77
III.2.3.1.	Pertes optiques	77
III.2.3.2.	Pertes résistives	77
III.2.3.3	Pertes par recombinaison de paires électron-trou	78
III.2.4.	Effet interne et externe sur une cellule solaire de type PN à base de 3C-SiC.	78
III.2.4.1.	L'effet de la température	78
III.2.4.2.	Effet des résistances séries et du shunt	80
III.2.5.	L'Etude de l'effet photovoltaïque d'homo-jonction PiN à base de 3C-SiC	81
III.2.6.	l'impact de l'intensité de l'illumination sur les cellules à base de 3C-SiC	82
	Conclusion	89
	Conclusion générale et perspectives	90
	Bibliographie	91

Liste des figures

Figure N°	Titre	Page
Figure I.1	Définition de la norme AM ; spectre représentant l'irradiance solaire hors atmosphère (AM0) et sur terre (AM1.5 global).	18
Figure I.2	schéma qui représente l'énergie du gap d'un semi-conducteur.	19
Figure I.3	Absorption d'un photon dans un matériau semi-conducteur; (a): structure de bande à gap direct et (b):structure de bande à gap indirect	20
Figure I.4	<i>Illustration</i> de principe et diagramme de bande d'une jonction P-N à l'équilibre La jonction P-N est un composant contenant deux régions (région dopé N et région dopé P).	21
Figure I.5	Schéma simplifié illustratif d'une cellule solaire	25
Figure I.6	Différentes générations des cellules solaires	26
Figure I.7	Structure (image gauche) et diagramme de bande (image droite) d'une cellule photovoltaïque. Les dimensions respectives des différentes zones ne sont pas respectées	29
Figure I.8	Caractéristiques de la densité de courant-tension d'une cellule dans l'obscurité et sous illumination	31
Figure II.1	Poly-types SiC; les sites de réseau non équivalents sont indiqués schématiquement par les zones hachurées (k) et multi-hachurées (h)	37
Figure II.2	<i>Cycle auto cohérent de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)</i>	46
Figure II.3	Potentiel « Muffin-Tin » (MT)	49
Figure II.4	Modèle de Pauwells Vanhoutte pour la recombinaison d'interface.	57
Figure II.5	Panneau de démarrage de SCAPS, le panneau d'action ou principal	60
Figure II.6	Présentation d'une structure sous SCAPS-1D	60
Figure II.7	Le point de fonctionnement.	61
Figure II.8	Panneau des bandes d'énergie.	62
Figure II.9	Panneau d'affichage des courbes I-V à l'obscurité et en éclairement.	62
Figure II.10	Définition de la structure d'une cellule solaire.	63
Figure II.11	Panneau des propriétés des contacts	63
Figure II.12	Propriétés de la couche ajouté	64
Figure II.13	Propriétés des dopages définis.	64
Figure II.14	Modèle de l'absorption	64
Figure III.1	Structures de carbure de silicium de cubique (3C-SiC) et hexagonal (2H-SiC et 4H-SiC) dans le code wien2k	68
Figure III.2	Les structures des bandes de carbure de silicium: (cubique 3C-SiC et hexagonal 2H-SiC et 4H(SiC) calculé avec les deux approximations GGA et Mbj avec le code Wien2k.	70
Figure III.3	la structure de la jonction PN à base de 3C-SiC.	74
Figure III.4	Caractéristique I-V de homo-jonction PN à base de 3C-SiC	75
Figure III.5	le rendement quantique de la cellule solaire à base de 3C-SiC(PN homo-jonction)	76
Figure III.6	l'effet de la variation de la température sur la caractéristique I-V d'une cellule solaire à base de 3C-SiC.	78
Figure III.7	Effet de la résistance série sur la caractéristique I-V d'une cellule solaire à base de 3C-SiC.	81
Figure III-8	Structure PiN à base de 3C-SiC	81
Figure III.9	le rendement quantique de la cellule solaire à base de 3C-SiC (PiN homo-jonction)	82
Figure III.10	Structure de la jonction PN et PiN de la cellule solaire à base de 3C-SiC	83
FigureIII.11	Caractérisation I-V des structures de jonction (a) PN et (b) PiN.	84
FigureIII.12	Niveaux d'énergie de flexion de la bande de la jonction PN et PiN	85
FigureIII.13	Densité de courant de court-circuit en fonction de l'intensité lumineuse.	86
FigureIII.14	Courants de recombinaison de vis sans fin en fonction de la tension appliquée pour les jonctions PN et PiN sous différentes intensités d'éclairage.	86
FigureIII.15	(A) Capacitance en fonction de la tension appliquée, (B) Conductance en fonction de la tension appliquée, pour les jonctions PN et PiN	89

Liste des tableaux

Tableau III.1	Résultats des propriétés structurales des structures: 3C-SiC, 2H-SiC et 4H-SiC de carbure de silicium	68
Tableau III.2	Les propriétés électroniques du carbure de silicium dans la structure cubique 3C-SiC et dans l'hexagonal: 2H-SiC et 4H-SiC.	69
Tableau III.4	les paramètres entrants	74
Tableau III.5	les caractéristiques électriques obtenus pour une homo-jonction à base de 3C-SiC	75
Tableau III.6	Effet de la température sur les caractéristiques électriques de la cellule solaire	80
Tableau III.7	Caractéristiques électriques obtenus pour une homo-jonction PiN à base de 3C-SiC	82
Tableau III.8	Paramètres utilisés dans la simulation	83
Tableau III.9	Propriétés photovoltaïques de cellules étudiées	84

Liste des symboles

H :	représente l'hamiltonien du système cristallin
Ψ :	sa fonction propre
E :	l'énergie propre.
T :	est l'énergie cinétique du système avec interaction
V :	le terme de l'interaction électrons-électrons
T₀:	est l'énergie cinétique du système sans interaction
V_H:	désigne le terme Hartree (l'interaction de Coulomb classique entre les électrons).
V_x:	le terme qui comprend les effets de l'échange et de la corrélation ($V_x=V-V_h$)
H:	hamiltonien de Kohn-Sham,
O:	matrice de recouvrement
ν :	Fréquence de la radiation.
λ :	Longueur d'onde de la radiation.
c:	Vitesse de la lumière.
E_P:	Énergie du photon en eV.
h:	Constante de Planck .
I_{ph} :	densité de courant photo-généré
I_{obsc} :	densité de courant d'obscurité
I_s :	courant de saturation de la diode,
q :	charge élémentaire,
k :	constante de Boltzmann
T :	température.
V_{co}	la tension de circuit ouvert qui est obtenue pour $J = 0$ mA/cm
J_{SC}	la densité de courant de court-circuit qui est obtenue pour $V = 0$ V
FF	le facteur de forme qui met en exergue les pertes dues à la diode, aux
P:	puissance maximum, mesurée aux bornes de la cellule photovoltaïque en Watt;
V:	tension maximum, mesurée aux bornes de la cellule photovoltaïque en Volt;

Liste des abréviations

SiC	Carbure de Silicium
3C-SiC	Carbure de Silicium (structure cubique)
2H-SiC	Carbure de Silicium (structure hexagonale)
4H-SiC	Carbure de Silicium (structure hexagonale)
P-SiC	Carbure de Silicium dopé de type P
N-SiC	Carbure de Silicium dopé de type N
Wien2K	Programme informatique écrit en Fortran.
DFT	Théorie de la fonctionnelle de la densité (density Functional Theory)
GGA	l'approximation du gradient généralisé (Generalized Gradient Approximation)
Mbj	l'approximation modifiée de Beck Jonhson
LDA	L'approximation de la densité locale (Local Density Approximation)
Ab-initio	méthode des ondes planes linéairement augmentées et a potentiel total plus les orbitales locales
FP-LAPW	La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (Full Potential –Linearized Augmented Plane Wave)
AM	Masse d'air
ZCE	Zone Charge d'Espace
SRH	Schockley-Read-Hall
SCAPS-1D	un simulateur de capacité de cellule solaire (a Solar Cell Capacitance Simulator)
IQE	Internal Quantum Efficiency
EQE	External Quantum Efficiency
BZ	la zone de Brillouin
MT	Muffin-Tin
LAPW+LO	The linearized augmented plane wave + local orbita
PN	Jonction semi-conducteur dopé de type N, semi-conducteur dopé de type P
PIN	Jonction semi-conducteur dopé de type N, semi-conducteur non dopé (intrinsèque) et semi-conducteur dopé de type P.
TCO	Les oxydes semi-conducteur transparent (Transparent Conductive Oxide)
SnO₂	Oxyde d'étain
ZnO	Oxyde de zinc

Introduction

Dans les deux dernières décennies, de nombreux chercheurs travaillaient pour améliorer le rendement des cellules solaires comme étant la principale composante dans les applications photovoltaïques. Parmi les objectifs importants de ses recherches est comment choisir le meilleur semi-conducteur caractérisé par des meilleures propriétés physiques très influentes dans les applications photovoltaïques et mettre ainsi un matériau atout de plus qui va contribuer au développement des énergies renouvelables et à la protection de l'environnement.

Parmi la variété des semi-conducteurs utilisés dans la fabrication photovoltaïque on trouve le Cadmium Cd, cependant, de nombreux chercheurs travaillaient sur le développement de la cellule CIGS sans utilisation de cadmium. Les couches tampons alternatives au CdS doivent remplir un certain nombre de spécificités comme : Une largeur de bande interdite supérieure à celle du CdS (2,4 eV).

Dans ce contexte, une problématique imminente à deux volets est nécessaire à exposer :

- D'un côté, les efforts fournis par les recherches récentes visent à retrouver une alternative du Cadmium dans les cellules solaires de type CIGS en se basant sur le fait qu'elles doivent posséder une large bande interdite supérieure au Gap de CdS (2,4 eV).
- D'un autre côté, le Silicium, élément indispensable dans la technologie (un composant semi-conducteur de la quatrième colonne du tableau périodique) avec toutes ses structures (monocristallin, amorphe et couche mince) dont il faut tenir compte dans le développement des applications photovoltaïques.

Le Si (le silicium) est le semi-conducteur le plus fameux dans les applications photovoltaïques et la réalisation des cellules solaires.

Le Silicium peut être sous une forme binaire avec le carbone C, un autre élément de la quatrième colonne de tableau périodique pour aboutir à un matériau avec des propriétés physiques plus efficaces, il s'agit de la combinaison carbure de silicium SiC, c'est un matériau poly type, d'une large bande interdite.

Le SiC est un matériau semi-conducteurs très importants dans la fabrication de composants électroniques qui fonctionnent dans une haute température.

En basant sur les propriétés de SiC ci-dessus, des interrogations sont évidentes :

- Le SiC, peut-il être appliqué dans la technologie photovoltaïque ?
- Peut-il être Considéré comme un matériau principal dans le domaine photovoltaïque?

- Peut-il être une bonne alternative à d'autres matériaux utilisés dans les applications photovoltaïques ?
- Quels sont les facteurs liés au rendement de la cellule solaire à base du SiC ?

Pour entamer la recherche des réponses à ces questions de recherche, des éventuelles hypothèses sont nécessaires à mettre en œuvre :

- L'identification des propriétés structurales et électroniques du SiC pourrait aider à sélectionner l'environnement le plus approprié pour les applications photovoltaïques.
- Le 3C-SiC serait la structure la plus largement utilisée dans la fabrication des diodes électroniques, son rendement pourrait être sélectionné sous la forme la plus simple des cellules solaires PN.

Dans ce travail, ciblent les objectifs suivants :

- ✓ Exposer les facteurs technologiques importants qui influencent le rendement cellulaire tels que la recombinaison Trou-électron
- ✓ Identifier l'effet de la cellule avec le lien PiN.
- ✓ Identifier d'autres facteurs technologiques influents comme l'intensité de la lumière sur le rendement de la cellule.

Ce travail se fait autour de la simulation pour l'amélioration des performances des cellules solaires ; Par principe, on fait l'élaboration des échantillons pratiquement puis leurs caractérisation se fait par l'analyse de pertes. Dans la présente étude, une simulation fondamentale avec de méthode DFT à l'aide de Wien2k est exposée pour étudier et optimiser les propriétés physiques, structurale et électronique de carbure de silicium SiC dans deux structures de ce matériau cubique 3C-SiC et hexagonale 2H-SiC, 4H-SiC avec deux approximations GGA et MBj intégrées dans le code Wien2k.

Opter pour ce matériaux était grâce à ces excellentes propriétés physiques à travers sa large bande interdite, sa dureté et l'habileté de dopage de différents type N et P qui donnent l'avantage de diverses applications électroniques.

Dans une deuxième partie de ce travail, nous nous sommes intéressés de l'application photovoltaïque du carbure de silicium et nous avons simulé des différentes structures des cellules solaires à savoir des jonctions PN et PiN à base du carbure de silicium dans sa phase cubique 3C-SiC, cette simulation a traité l'effet des facteurs technologiques limitant le rendement tel que:

Les Pertes optiques qui ont été réduit par usage d'une couche antireflet, les pertes résistives, les pertes par recombinaison par introduction d'une couche intrinsèque avec étude de la

jonction PiN sous les conditions physiques suivantes: l'impact de l'intensité de l'illumination et de la température sur les caractéristiques des cellules.

Une méthodologie instaurée pour cette étude repartie comme suit :

- Etude de l'effet de la couche fenêtre (la nature de matériaux et le nombre des couches) sur les caractéristiques de cellule. On note ici une comparaison entre les deux matériaux TCO comme couche antireflet qui sont ZnO et SnO₂.
- Etude de l'effet des conditions de travail sur la cellule comme : la résistance et la température sur les quatre paramètres de sortie : le courant, la tension, le facteur de forme, le rendement, et l'intensité de l'illumination.

Le terme de ce volume de travail de thèse de doctorat est une conclusion générale portant l'essentiel des résultats obtenus avec une perspective des éventuels travaux futurs.

Chapitre 1

I.1 Introduction

Dans ce chapitre, des généralités sur la source de l'énergie solaire (le soleil) et des notions fondamentales sur la conversion photovoltaïque sont présentées avec un focus élargi sur l'élément clé dans la conversion photovoltaïque qui est la cellule solaire.

Les panneaux photovoltaïques contiennent des semi-conducteurs qui permettent de transférer la lumière solaire en électricité à travers un effet dite photovoltaïque.

Dans ce chapitre en traite le principe de fonctionnement et les caractéristiques principaux de la cellule solaire, le spectre solaire, la conversion photovoltaïque dans les semi-conducteurs, les différentes générations des cellules solaires et leurs paramètres caractéristiques électriques ?

Une discussion des différents types de pertes qui peuvent exister dans une cellule solaire (optique, ohmiques, et par recombinaison) sont présentées en terme de ce chapitre.

I.2. L'énergie solaire :

Primitivement le soleil est la source de vie sur la terre, la distance entre la terre et le soleil est environ 150 kilomètres sous la vitesse de la lumière, le rayon du soleil prend presque 8 minutes pour arriver à la terre, elle reçoit une petite partie de cette énergie en moyenne ,1367 watts atteignent chaque mètre chaque mètre-carré de la couche atmosphérique externe .Grâce à l'absorption la densité de l'énergie solaire se réduit à 1000 W/m^2 [1] D'après Albert Einstein la lumière n'a pas qu'un caractère ondulatoire car il y a des particules (photons) portant une énergie donnée par la relation :

$$E_p = hc/\lambda \tag{I-1}$$

v : Fréquence de la radiation.

λ : Longueur d'onde de la radiation.

C: Vitesse de la lumière.

E_p: Énergie du photon en eV.

h: Constante de Planck .

Alors l'énergie de chaque photon est reliée à la fréquence v et la constante de Planck h.

On introduit la notion de masse d'air (AM_x) (Figure I.1). Pour pouvoir comparer les performances de cellules solaires utilisées. Le nombre de masse AM est défini par la relation [2] :

$$AM = \frac{1}{\cos(\theta)} \quad (I-2)$$

Elle correspond à la perte de l'énergie solaire par l'absorption atmosphérique [3] La figure (I-1) montre le spectre d'irradiance solaire hors atmosphère (AM_0) et sous $AM_{1.5}$ global normalisé à 100 mW/cm^2 [4]

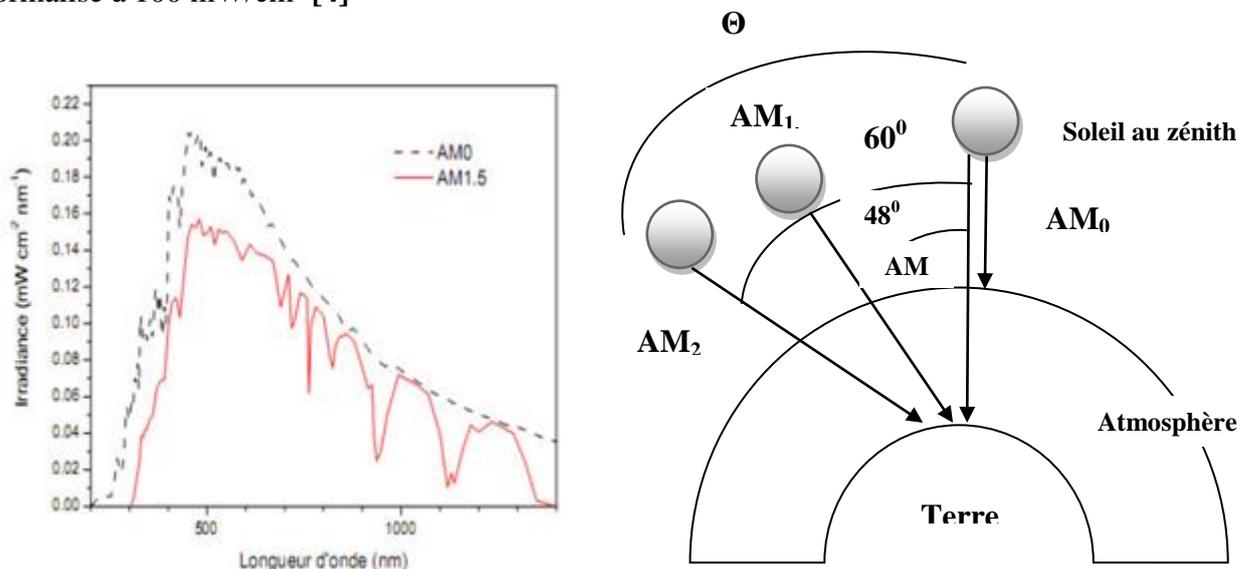


Figure I.1 : Définition de la norme AM ; spectre représentant l'irradiance solaire hors atmosphère (AM_0) et sur terre ($AM_{1.5}$ global).[5]

I.3. La conversion photovoltaïque

Les trois étapes principales de la conversion photovoltaïque sont [6] :

- La génération d'une paire électron-trou : le semi-conducteur qui expose à la lumière absorbe tous les photons incidents qui ont l'énergie supérieure ou égale l'énergie de la bande interdite de semi-conducteur à cause de l'absorption optique ;
- La séparation du pair électron -trou dans le semi-conducteur sans recombinaison ;
- La collecte des charges libérées par les électrodes de cellule solaire.

Les panneaux photovoltaïques sont composés de semi-conducteurs qui permettent de transformer directement la lumière du soleil en électricité. Les cellules photovoltaïques (PV) sont des composants optoélectroniques capables de convertir directement la lumière en électricité, en utilisant l'interaction de la lumière avec certains matériaux semi-conducteurs.

Le principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque fait appel aux propriétés du rayonnement solaire et celles des semi-conducteurs [7]. Les matériaux se caractérisent par ce phénomène qui s'appelle les semi-conducteurs.

I.4. Les semi-conducteurs

Les sciences physiques des matériaux classent les matériaux électriquement en trois types comme nous présentons dans la figure suivante[8]:

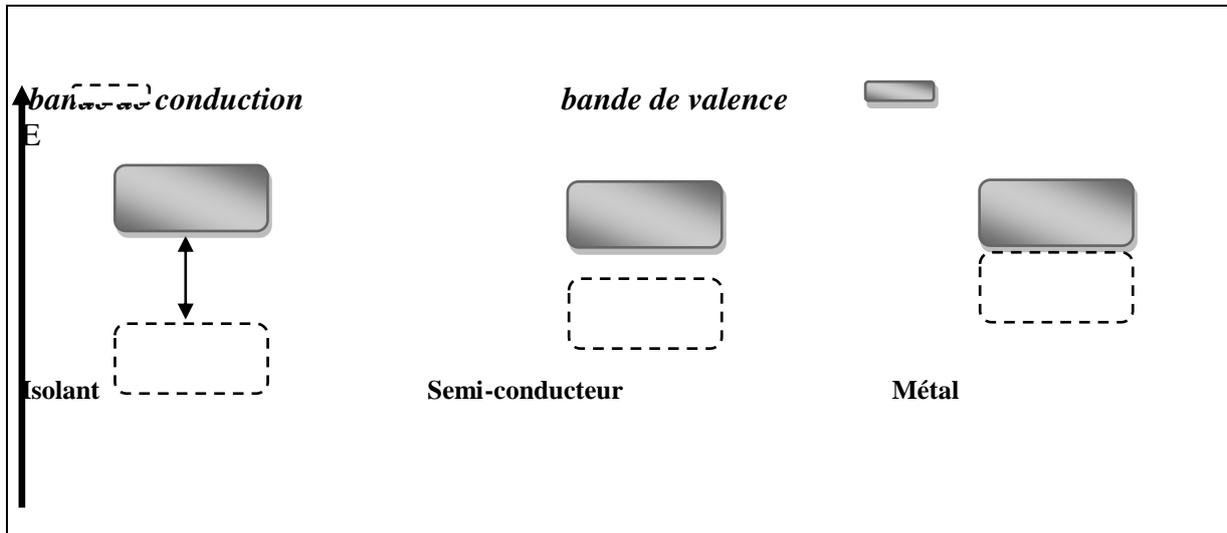


Figure I.2 : schéma qui représente l'énergie du gap d'un semi-conducteur.

- **Les Isolants** : les matériaux dont la résistivité est typiquement supérieure à $10^8 \Omega \cdot m$ sont considérés comme isolants ; comme le verre, carbone (diamant).
- **Les métaux** : qui sont les matériaux ayant la plus faible résistivité à température ambiante, typiquement inférieur à $10^{-5} \Omega \cdot m$ comme cuivre, or, Argent, aluminium...). Dans ce type de matériau la conduction électrique s'effectue essentiellement par les électrons libres dont la concentration diffère peu d'un métal à l'autre (de 10^{22} à 10^{23} cm^{-3}).
- Un matériau intermédiaire qui s'appelle **semi-conducteur** a pour résistivité variable de 10^{-3} à $10^4 \Omega \cdot m$ dont la conduction électrique se fait par les électrons et les trous. Le semi-conducteur peut être sous deux types intrinsèques dopés par des impuretés qui permettent d'optimiser et contrôler sa résistivité (sa conduction) N et P.

Notion de Gap dans les semi-conducteurs :

C'est une partie qui sépare la bande de conduction et la bande interdite, en trouve deux principale catégories : directe et indirecte, figure [9] :

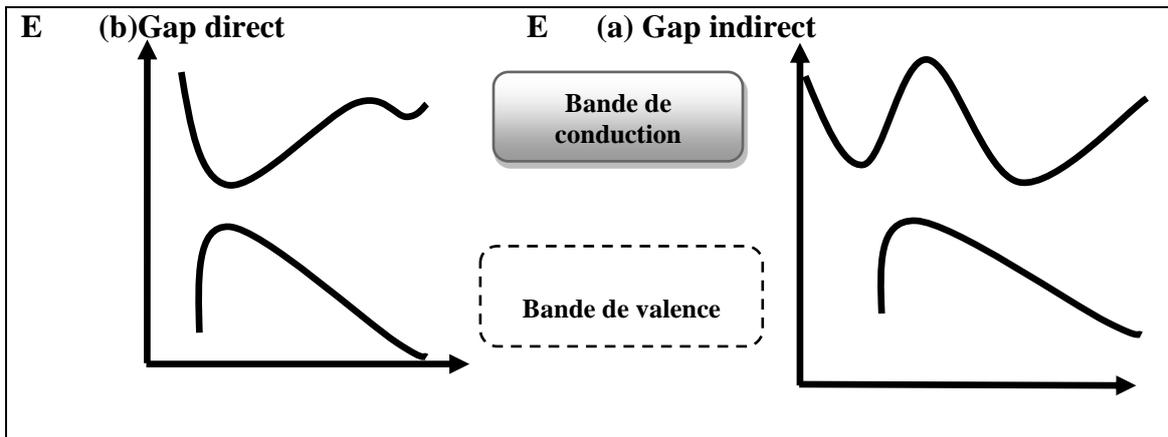


Figure I.3: Absorption d'un photon dans un matériau semi-conducteur; (a): structure de bande à gap direct et (b):structure de bande à gap indirect

- Dans les semi-conducteur à *gap direct* lorsque le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont obtenus pour une même valeur du vecteur d'onde k (voir **figure I.3** (a)). Donc Les transitions entre la bande de conduction vers la bande de valence sont radiatives (émission spontanée).
- Dans le semi-conducteur à *gap indirect* lorsque le minimum de la bande de conduction est décalé par rapport au maximum de la bande de valence dans l'espace des k , les transitions entre la bande de conduction vers la bande de valence impliquent un changement de vecteur d'onde k et sont donc

Non-radiatives (voir figure II.3(b)). celui qui très important pour les dispositif électronique : compound optoélectronique ; LED ; Light Emitting Diodes ; laser diode ; DLs ; lasers Semiconductor ; AOS ; amplifieur optic ; solar cells ; PV ; TPV ; photovoltaic ; Termophotovoltaic ; photodiode ; PAD ; PSD. [10]pour utilise ce type de matériau (semi-conducteur) il faut augmenter la conductivité des semi-conducteurs on y introduit des impuretés. Ce procédé est appelé dopage. Selon les porteur des charge major nous précisons le type de dopage, c'est-à-dire : si les électrons sont les porteur major dans un semi-conducteur ce dernier est dopé de type N, si les trous sont les porteurs major dans un semi-conducteur ce dernier est dopé de type P.

I.4.1. Les différents types de dopage de semi-conducteurs

I.4.1.1. Type N

L'injection d'une imperceptible quantité des atomes (de type donneur) joue le rôle des impuretés dans un semi-conducteur donnant un dopage de type N où les porteurs majors sont des électrons.

Le matériau dopé de type N est un semi-conducteur quand la concentration de donneurs est supérieure la concentration d'accepteurs parce que la concentration des électrons est largement supérieure à la concentration des trous ($N_D - N_A > 0$) ce qui renvoie à la définition d'un semi-conducteur dopé N.[11]

I.4.1.2. Type P

L'injection d'une imperceptible quantité des atomes (de type accepteur) joue le rôle des impuretés dans un semi-conducteur donne un dopage de type P où les porteurs majors sont les électrons. Le matériau dopé P est un semi-conducteur quand la concentration d'accepteurs est supérieure à la concentration de donneurs parce que la concentration des trous est largement supérieure à la concentration des électrons. ($N_A - N_D > 0$) ce qui renvoie à la définition d'un semi-conducteur dopé P. [12]

I.4.2. Jonction P-N

La plus part des applications électroniques des semi-conducteur doivent être avec l'état dopé de ce type de matériaux alors pour obtenir des dispositifs électroniques soit, les diodes, les capteur les transistor et les panneaux photovoltaïques il faut créer un contact entre les deux types de semi-conducteur N et P pour avoir la base d'un composant électronique qui s'appelle la jonction PN[13].

Elle Permet les applications intéressantes des semi-conducteurs comme celles des applications photovoltaïques et solaires en générale.

La structure simple de cette jonction est présentée dans la figure suivante[14]:

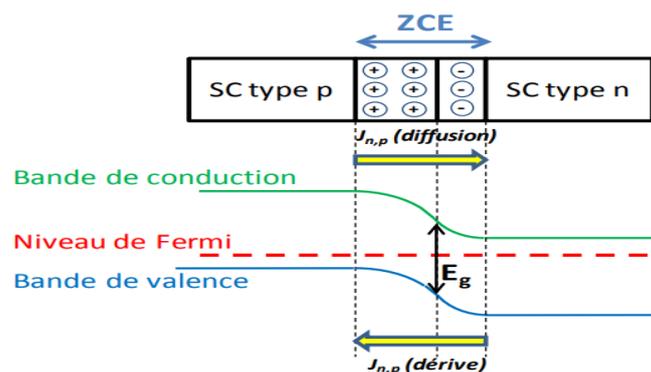


Figure I.4 : Illustration de principe et diagramme de bande d'une jonction P-N à l'équilibre
La jonction P-N est un composant contenant deux régions (région dopé N et région dopé P).

Quand la région dopée p est mise en contact avec la région N, les électrons et les trous diffusent automatiquement d'une part et la jonction, créant ainsi une zone de déplétion où la concentration en porteurs libres est presque nulle d'une autre part. La longueur de la zone de déplétion se diffère selon la tension appliquée d'un côté et de la jonction d'un autre, plus cette zone est courte, plus la résistance de la jonction est faible.

Les cellules photovoltaïques sont aussi constituées d'une jonction P-N de grande surface dans laquelle les paires électron-trou créées par la lumière sont séparées par le champ électrique de la jonction constituée d'une base en semi-conducteur de type P dopée localement pour former l'émetteur. La différence de concentration d'électrons entre la zone N et P provoque une tension de diffusion à la jonction des deux zones de conductivité opposée. La tension de diffusion entraîne un champ électrique primordial à la jonction, dans une zone appelée ZCE (Zone Charge d'Espace) la jonction P-N est un composant qui contient deux régions.

I.4.3. La recombinaison

Les applications des semi-conducteurs dans les composants électroniques surtout les cellules photovoltaïques basées sur deux principes très importants [16]:

- Maximiser l'absorption de la lumière
- Réduit les recombinaisons électron-trou

La présence d'impuretés joue un rôle indispensable dans le processus de recombinaison. Une impureté piège un électron (ou trou) qui par attraction coulombienne attire un trou (ou électron), ce qui provoque la recombinaison.

Il y a trois principaux mécanismes de recombinaison des porteurs de charge :

- Recombinaison radiatives ou bande à bande;
- Recombinaison Indirecte de Shokley-Read-Hall (SRH) celui via les centres profonds introduits par les défauts cristallins et les atomes impuretés;
- Recombinaison Auger.

I.4.3.1. Les types de recombinaison :

I.4.3.1.1. Recombinaison radiative « bande à bande »

Quand le mécanisme inverse de l'absorption optique où une éléction de la bande de conduction se combine avec un trou dans la bande de valence, la recombinaison dans ce cas est radiative.

Par ailleurs, l'énergie de photon émis équivaut à l'énergie du gap de la bande interdite du matériau, ce phénomène se caractérise par la courte durée de vie des porteurs minoritaires. En effet, taux de recombinaison total est relatif à la concentration dans le matériau. Ce processus est important pour les matériaux à gap directe et faible pour les matériaux à gap indirect.[17]

I.4.3.1.2. Recombinaison indirecte ou assisté « par piège »

Ce type de mécanisme de recombinaison appelé aussi "Hall-Shockley-Read", ce mécanisme assisté se produit dans les semi-conducteurs à gap indirect. Cette recombinaison basée sur les défauts de la structure du réseau précisément dans la bande interdite sous forme d'un piège entre la bande de valence et la bande de conduction.[17]

I.4.3.1.3. Recombinaison Auger

Les recombinaisons de type Auger sont similaires aux recombinaisons radiatives : un électron et un trou se recombinent dans la bande de valence. L'énergie supplémentaire ne conduit pas à l'émission d'un photon, elle est transmise à un troisième porteur qui va thermaliser en émettant des phonons [17-18].

I.4.3.1.4. Recombinaison superficielle

Comme on l'a vu précédemment, il est nécessaire de distinguer les recombinaisons en surface de celles en volume. La surface est une zone présentant de fortes discontinuités. En effet, le réseau cristallin en surface se voit modifié, car certaines liaisons sont inoccupées (liaisons pendantes) ou occupées par des atomes d'oxygène (oxyde natif qui présente des défauts d'interface). Ces modifications entraînent l'apparition d'un grand nombre de niveaux d'énergie dans la bande interdite. Le même formalisme que pour les recombinaisons SRH de volume peut être appliqué pour décrire les défauts de surface, en considérant le taux de recombinaisons par unité de surface plutôt que par unité de volume. En supposant un seul niveau d'énergie piège, associé aux défauts de surface, on définit le taux de recombinaison à la surface en $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$ comme [Kerr02 [19]:

I.5. L'effet photovoltaïque

En 1839 le physicien français Alexandre Edmond Becquerel découvrit pour la première fois que certains matériaux délivrent une petite quantité d'électricité le moment d'exposition à la lumière [20]. Les composant optoélectroniques qui sont capables de

convertir directement la lumière en électricité à l'interaction de la lumière sont les cellule photovoltaïques (PV).[21]. Le principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque fait appel aux propriétés du rayonnement solaire et celles des semi-conducteurs.[22].

Dans une cellule photovoltaïque typique, deux couches de matériaux semi-conducteurs dopés sont étroitement liées (voir la figure 1.3). Une couche est modifiée pour avoir des électrons libres en excès (appelée couche n), tandis que l'autre couche comporte un excès de trous ou de lacunes (un lecteur) d'électrons. Lorsque les deux couches semi-conductrices différentes sont reliées à une frontière commune, les électrons libres de la couche n se croisent -couche dans une tentative de combler les trous d'électron. La combinaison d'électrons et de trous au niveau de la jonction P-N crée une barrière qui rend de plus en plus difficile la traversée d'électrons supplémentaires. Lorsque le déséquilibre électrique atteint une condition d'équilibre, il se forme un champ électrique fixe à travers la limite séparant les deux côtés.

Quand une lumière de longueur d'onde appropriée frappe la cellule en couches et est absorbés, les électrons sont libérés pour voyager au hasard et les électrons proches de la limite (la jonction PN) peuvent être balayés à travers la jonction par le champ fixe.

Du fait que les électrons peuvent facilement franchir la limite et ne peuvent pas revenir dans l'autre direction (contre le gradient de champ), alors il se produit un déséquilibre de charge entre les deux régions semi-conductrices.

Les électrons entraînés dans la couche N par les effets localisés du champ fixe ont une tendance naturelle à quitter la couche pour corriger le déséquilibre de charge. En fournissant un circuit externe par lequel les électrons peuvent retourner vers l'autre couche, un flux de courant est produit et se poursuivra tant que la lumière frappe la cellule solaire [23].

Des couches de contact métalliques sont appliquées sur les faces extérieures des deux couches semi-conductrices afin de fournir un chemin au circuit externe qui relie les deux couches où le résultat final est la production d'énergie électrique dérivée directement de l'énergie de la lumière. La tension produite par les cellules solaires varie en fonction de la longueur d'onde de la lumière incidente, mais les cellules typiques sont conçues pour utiliser le spectre large de la lumière du jour fourni par le soleil.

I.6. Principe de fonctionnement

Le dispositif optoélectronique capable de capter et convertir directement l'énergie des rayons lumineux en électricité est la cellule solaire [24]

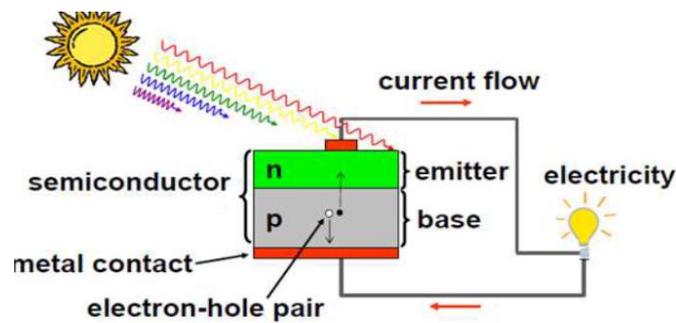


Figure I.5 : Schéma simplifié illustratif d'une cellule solaire

I.6.1. Historique

Le schéma ci-dessus représente un bref aperçu historique des énergies renouvelables et l'apparition des cellules solaires, nous pouvons l'interpréter linéairement comme suit[25] :

1. Au cours du 18^{ème} siècle, le monde a su une révolution industrielle qui a remarquablement modifié tous les domaines (l'économie, l'agriculture et la société).
 - Sur le plan économique une consommation incessante des énergies
 - Sur le plan technologique, le développement de plusieurs moyens.
2. Durant les années 1970, les crises successives du pétrole qui ont multiplié le prix du baril par trois a abouti à un développement des nouvelles sources d'approvisionnement dans le but de résoudre le problème du déficit économique tel que la fission nucléaire étant une source d'énergie alternative.
3. En 1979, les deux évènements dits « l'accident de Three Mile Island aux Etats Unis » et « la Catastrophe de Tchernobyl en Ukraine » ont figuré sévèrement les grands risques que l'humanité pourrait culminer à long terme, ce qui a surgi le développement des énergies renouvelables dépourvues de risques majeurs et de polluants en utilisant diverses « Ressources d'énergies renouvelables » comme : la chaleur de la terre, le vent, le soleil, les chutes d'eau...

I.6.2. Les type des cellules

La cellule solaire est un constituant semi-conducteur convertissant l'éclairement incident en Electricité par absorption du Flux lumineux solaire.[26]

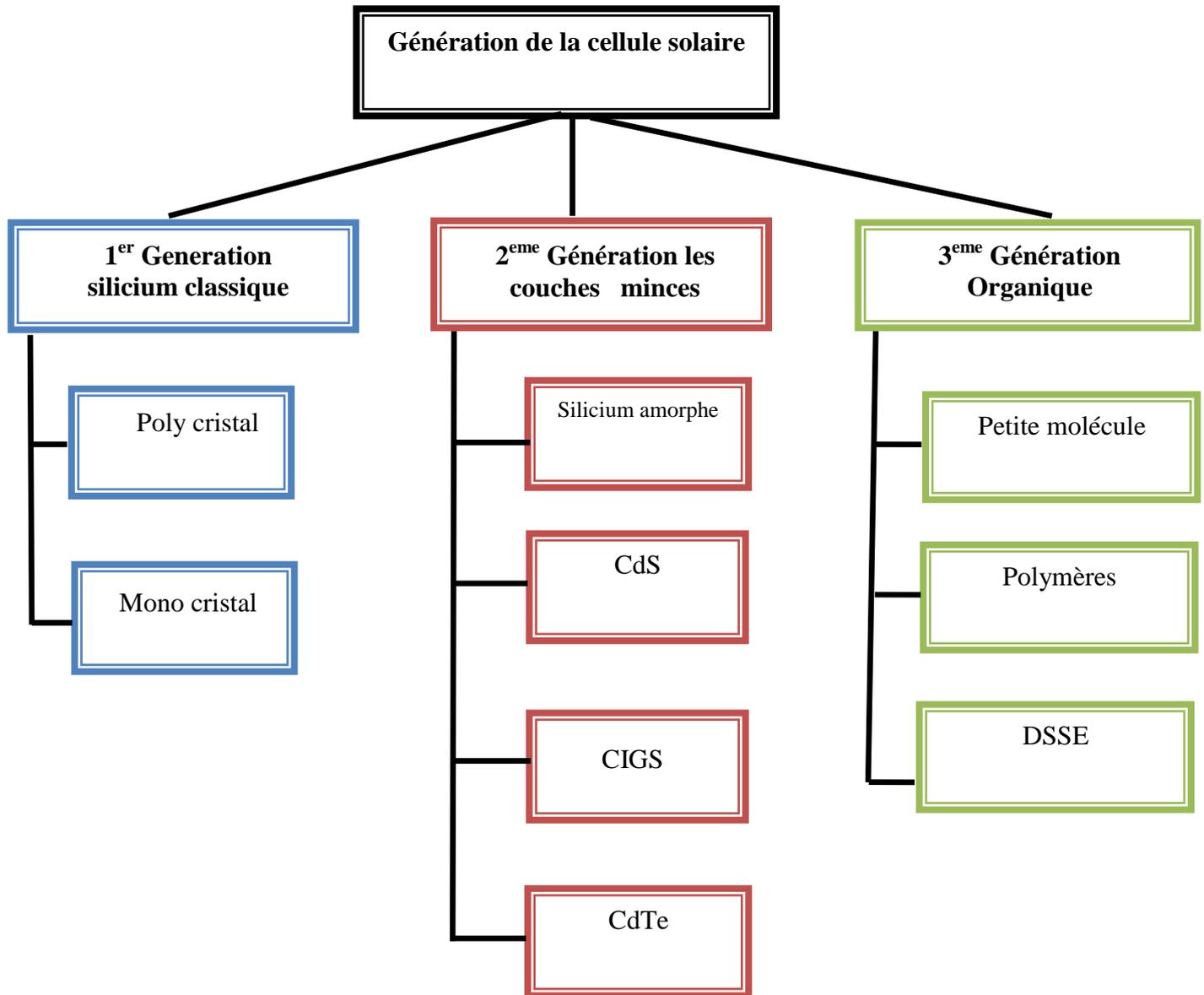


Figure I.6 Différentes générations des cellules solaires [27].

En général, la 1^{ère} génération de cellules solaire comporte les cellules solaires monocristallines et les cellules solaires poly-cristallines, autrement du type de technologie plus ancien et plus utilisé. Grâce à son efficacité élevée (15 à 20%).

En fait, les cellules solaires de 1^{ère} génération sont produites sur des plaquettes, chaque tranche peut doter une puissance de 2-3 watts. En outre les modules solaires servent à augmenter la puissance.

Les attributions de cette technologie de cellules solaires résident dans le fait d'avoir de bonnes performances ainsi que dans leur grande stabilité. Néanmoins, ils sont inflexibles, ils exigent beaucoup d'énergie pour la production [28].

Les cellules solaires de la 2^{ème} génération se sont concentrées sur les cellules à film mince a-Si, les cellules solaires mc-Si, le CdTe, cellules solaires, cellules solaires CIS et CIGS. La performance représentative est de 10 à 15%. Donc, leurs rendements sont inférieurs à ceux de la 1^{ère} génération, leurs coûts sont également inférieurs à ceux de la 1^{ère} génération. Dans l'ensemble, cellules solaires de la 2^{ème} génération sont appelées cellules solaires à couche minces différentes aux cellules solaires traditionnelles.

Cellule solaire au sulfure d'étain et de zinc (CZTS), et dérivés CZTSe et CZTSSe

- Cellule solaire à colorant, également appelée "cellule de Grätzel"
- cellule solaire organique
- Cellule solaire pérovskite
- Cellule solaire en polymère
- Cellule solaire à points quantiques
- Cellule solaire à nano-fils

I.6.2.1. Cellule solaire à colorant

Une cellule solaire sensible aux colorants (DSSC, DSC ou DYSC) est une cellule à faible coût appartenant au groupe de cellules solaires en couches minces. Ce type est basé sur un semi-conducteur formé entre une anode photo sensibilisée et un électrolyte, un système photo électrochimique. Le DSSC présente un certain nombre de fonctionnalités intéressantes et simple à réaliser à l'aide des techniques classiques d'impression au rouleau, semi-flexible et semi-transparent, offrant une variété d'utilisations non applicables aux systèmes à base de verre, la plupart des matériaux utilisés sont économiques[29].

I.6.2.2. Cellule solaire organique

Une cellule solaire organique ou plastique est un type de photovoltaïque qui utilise une branche de l'électronique qui traite de polymères organiques conducteurs ou de petites molécules organiques, pour l'absorption de la lumière et le transport de charge pour produire de l'électricité à partir de la lumière solaire par le photovoltaïque. Les molécules utilisées dans les cellules solaires organiques peuvent être transformées en solution à un débit élevé et sont peu coûteuses, ce qui entraîne de faibles coûts de production pour la fabrication d'un volume important. Combinées à la flexibilité des molécules organiques, les cellules solaires

organiques sont potentiellement rentables pour les applications photovoltaïques. Les principaux inconvénients associés aux cellules photovoltaïques organiques sont: un faible rendement, une faible stabilité et une résistance faible par rapport aux cellules photovoltaïques inorganiques telles que les cellules solaires au silicium [29].

I.6.2.3. Cellule solaire pérovskite

Une cellule solaire pérovskite est un type de cellule solaire qui comprend une structure pérovskite structurée composée le plus souvent d'un matériau hybride organique-inorganique à base de plomb ou d'halogénure d'étain, comme la couche active collectant la lumière. Les matériaux de pérovskite tels que les halogénures de plomb méthyle ammonium sont peu coûteux à produire et simples à fabriquer [29].

I.6.2.4. Cellule solaire polymère

Une cellule solaire en polymère est un type de cellule solaire flexible composée de polymères, de grosses molécules avec unités structurelles récurrentes, qui produisent de l'électricité à partir de la lumière solaire par effet photovoltaïque. Les cellules solaires à polymères comprennent les cellules solaires organiques (également appelées "cellules solaires en plastique"). Il s'agit d'un type de cellule solaire à couche mince, les autres incluent la cellule solaire au silicium amorphe, plus stable [29].

I.6.2.5. Cellule solaire à points quantiques

Une cellule solaire à points quantiques est une conception de cellule solaire qui utilise des points quantiques comme absorbants. Matériau photovoltaïque. Il tente de remplacer des matériaux en vrac tels que le silicium, le cuivre indium séléniure de gallium (CIGS) ou CdTe. Les points quantiques ont des band gaps réglables sur une large gamme de niveaux d'énergie en modifiant la taille des points. Dans les matériaux en vrac, la bande interdite est fixée par le choix du ou des matériaux. Cette propriété rend les points quantiques attrayants pour les cellules solaires multi-jonctions, où une variété de matériaux est utilisée pour améliorer l'efficacité en récoltant de multiples parties du spectre solaire [29].

I.6.2.6. Cellule solaire à nano-fils

L'application de nanotechnologies aux cellules solaires vise à réduire les coûts de fabrication et à obtenir une plus grande efficacité de conversion de puissance. En comparant avec les cellules solaires traditionnelles, beaucoup moins les matériaux sont utilisés dans des dispositifs nanostructures et, par conséquent, des cellules solaires peu coûteuses sont fabriquées avec des films beaucoup plus minces. Une cellule solaire nanostructure peut avoir une couche absorbante (côté P du dispositif à semi-conducteur) d'une épaisseur aussi mince

que 100 nm ou moins, voire plus fine que celle d'une cellule solaire à film mince classique d'une épaisseur de plusieurs micromètres.

La géométrie des nano-fils offre des avantages potentiels par rapport aux cellules solaires planes à base de wafers ou à couche mince à chaque étape du processus de photo conversion. Ces avantages incluent une réflexion réduite, une capture de lumière extrême, une relaxation des contraintes, un meilleur réglage de la bande interdite et une tolérance accrue aux défauts. Ces avantages ne devraient pas augmenter l'efficacité maximale au-delà de la limite standard; au lieu de cela, ils réduisent la quantité et la qualité du matériel nécessaire pour se rapprocher de ces limites, permettant ainsi une réduction substantielle des coûts [29].

I.6.3. Le principe de fonctionnement d'une cellule solaire

Une cellule photovoltaïque est un dispositif qui permet de transformer l'énergie solaire en énergie électrique. Cette transformation est basée sur les trois mécanismes suivants[30] :

- Absorption des photons (dont l'énergie est supérieure au gap) par le matériau constituant le dispositif ;
- Conversion de l'énergie du photon en énergie électrique, ce qui correspond à la création de paires électron/trou dans le matériau semi-conducteur ;
- Collecte des particules générées dans le dispositif.

Le matériau constituant la cellule photovoltaïque doit donc posséder deux niveaux d'énergie et être assez conducteur pour permettre l'écoulement du courant : d'où l'intérêt des semi-conducteurs pour l'industrie photovoltaïque.

Afin de collecter les particules générées, un champ électrique permettant de dissocier les paires électrons / trou créées est nécessaire. Pour cela on utilise le plus souvent une jonction p-n. D'autres structures, comme les hétérojonctions et les Schottky peuvent également être utilisées. Le fonctionnement des cellules photovoltaïques est illustré sur la figure I-7 :

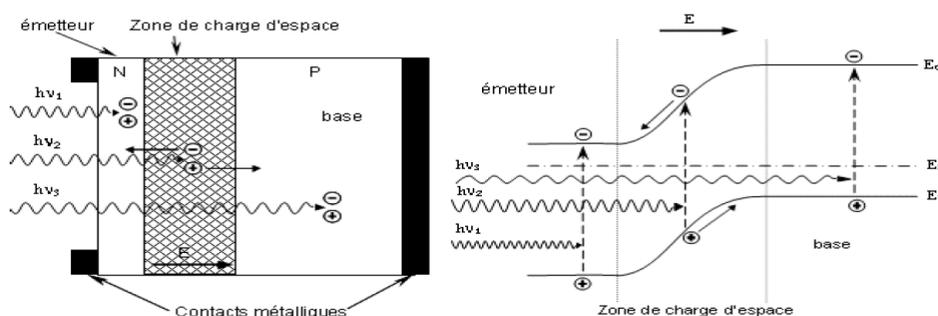


Figure I-7 Structure (image gauche) et diagramme de bande (image droite) d'une cellule photovoltaïque. Les dimensions respectives des différentes zones ne sont pas respectées [30].

Les photons incidents créent des porteurs dans les zones n et p et dans la zone de charge d'espace. Les phot porteurs auront un comportement différent suivant la région [31].:

- dans la zone n ou p, les porteurs minoritaires qui atteignent la zone de charge d'espace sont "envoyés" par le champ électrique dans la zone p (pour les trous) ou dans la zone n (pour les électrons) où ils seront majoritaires. On aura un photo-courant de diffusion ;
- dans la zone de charge d'espace, les paires électrons / trou créées par les photons incidents sont dissociées par le champ électrique : les électrons vont aller vers la région n, les trous vers la région p. On aura un photo-courant de génération.

Ces deux contributions s'ajoutent pour donner un photo-courant résultant I_{ph} de porteurs et proportionnel à l'intensité lumineuse.

Le courant délivré sur une charge par une cellule photovoltaïque éclairée s'écrit [31] :

$$I(V) = I_{ph} - I_{obs}(V) \quad (\text{I-3})$$

Avec :

I_{ph} : densité de courant photo-généré et I_{obs} : densité de courant d'obscurité.

Pour une cellule photovoltaïque idéale, l'équation (I-3) peut être écrite sous la forme suivante [31]. :

$$I(V) = I_{ph} - I_s \left(\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right) \quad (\text{I-4})$$

avec :

I_s : courant de saturation de la diode, q : charge élémentaire, k : constante de Boltzmann,

T : température.

Ainsi, dans une cellule photovoltaïque, deux courants s'opposent : le courant d'éclairage et un courant de diode appelé courant d'obscurité qui résulte de la polarisation du composant. La caractéristique d'une cellule sous obscurité est identique à celle d'une diode.[31].

I.6.4. Les paramètres photovoltaïques d'une cellule solaire

La mesure du courant surfacique en fonction de la tension permet de caractériser une cellule photovoltaïque. On parle d'ailleurs couramment de caractéristique $J(V)$. Pour cela, deux mesures sont réalisées : l'une en absence d'excitation lumineuse, l'autre sous éclairage contrôlé. La Figure I.8 montre des caractéristiques $J(V)$ classiques pour un dispositif photovoltaïque. La courbe $J(V)$ obtenue dans l'obscurité est celle d'une diode

sous illumination, $J(V)$ permet de déterminer la puissance maximale produite P_{max} , ainsi que la densité de courant et la tension correspondant, J_{max} et V_{max} respectivement [32].

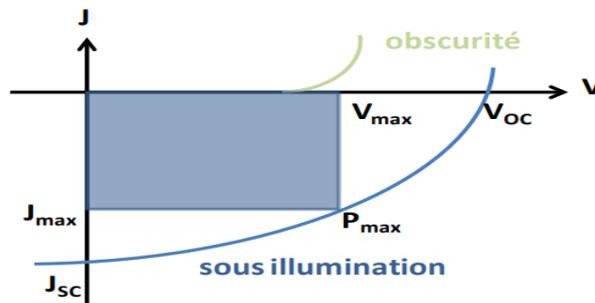


Figure I-8 Caractéristiques de la densité de courant-tension d'une cellule dans l'obscurité et sous illumination.

Ces deux courbes permettent d'obtenir trois caractéristiques de la cellule :

- V_{oc} : la tension de circuit ouvert qui est obtenue pour $J = 0 \text{ mA/cm}^2$
- J_{sc} : la densité de courant de court-circuit qui est obtenue pour $V = 0 \text{ V}$
- **FF** : le facteur de forme qui met en exergue les pertes dues à la diode, aux recombinaisons et aux résistances parasites

I.6.4.1. La densité du courant de court-circuit J_{sc}

La valeur de I_{sc} correspond à l'intensité du courant de court-circuit. C'est-à-dire que :

$$I_{sc} = (V = 0)$$

Pour une cellule solaire idéale le courant de court-circuit est égal au courant photovoltaïque I_{ph} [33].

I.6.4.2. La tension en circuit ouvert V_{oc}

La tension de circuit ouvert (V_{co}) est la suivante: il s'agit de la tension entre les bornes quand aucun courant n'est utilisé (résistance de charge infinie). V_{co} est la tension maximale disponible d'une cellule solaire lorsque la courant est traversé par la jonction est égal à zéro et peut être exprimé comme suit : [33].

$$V_{co} = \frac{nkT}{q} \ln \left(\frac{I_L}{I_0} + 1 \right) \quad \text{(I-5)}$$

Pour une cellule solaire idéale la tension de circuit ouvert est donnée par ;

$$V_{co} = \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{I_{ph}}{I_s} - 1 \right) \approx V_{co} = \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{I_{ph}}{I_s} \right) \quad \text{(I-6)}$$

Courant de court-circuit (I_{sc}): Courant lorsque les bornes sont connectées les unes aux autres (résistance de charge nulle). J_{sc} est la densité de courant qui traverse la jonction sous illumination avec une polarisation appliquée nulle. Dans le cas idéal, J_{sc} est égal à la densité de courant photo-générée (J_L). Par conséquent, le courant de court-circuit est le courant le plus important pouvant être tiré de la cellule solaire. Le courant de court-circuit et la tension à vide sont le courant et la tension maximum respectivement d'une cellule solaire. Cependant, à ces deux points de fonctionnement, la puissance du cellule solaire est zéro. Le point de la courbe $J - V$ donnant la puissance maximale est appelé point de puissance maximale. la densité de courant et la tension correspondantes sont le courant maximal J_{mp} et la tension maximale V_{mp} [33].

I.6.4.3. le facteur de forme FF(facteur des pertes)

Le facteur de remplissage est un paramètre qui détermine la puissance maximale d'une cellule solaire. Le FF est défini comme le rapport entre la puissance maximale de la cellule solaire et le produit de V_{oc} et I_{sc} . Le FF est une mesure de la perpendicularité de la courbe $J - V$ et est également l'aire du plus grand rectangle qui tiendra dans la courbe IV . [33], Dans des conditions ambiantes de fonctionnement fixes; éclairement, température, vitesse de circulation de l'air ambiant, etc., la puissance électrique $P(W)$ disponible aux bornes d'une cellule photovoltaïque est égale au produit du courant continu fourni I par une tension continue V [33].

$$P_m = V_m I_m \quad (\text{I-7})$$

P: puissance maximum, mesurée aux bornes de la cellule photovoltaïque en Watt;

V: tension maximum, mesurée aux bornes de la cellule photovoltaïque en Volt;

I: intensité maximum, mesurée de courant aux bornes de la cellule photovoltaïque en Ampère

Le facteur de forme indique à la qualité de cellule, il indice l'influence des pertes

Par les deux résistances parasites R_{set} R_{sh} . [33]

$$FF = \frac{P_m}{I_{sc} V_{co}} \quad (\text{I-8})$$

I.6.4.4. Le rendement de conversion η

Le rendement η est alors défini comme le rapport entre la puissance électrique maximale produite par la cellule et la puissance du flux incident reçu par la cellule $P_{incidente}$.

$$\eta = \frac{P_m}{P_i} = \frac{I_{cc} * V_{co} * FF}{P_{in}} \quad (\text{I-9})$$

Où : est la puissance incidente du rayonnement solaire au sol

I.6.4.5. Le rendement quantique QE

Le rendement quantique est le rapport entre le nombre d'électrons dans le circuit externe et le nombre de photons incidents. Il y a deux grandeurs du rendement quantique interne IQE (Internal Quantum Efficiency) et externe, EQE (External Quantum Efficiency) [33], la différence entre les deux :

- Dans IQE ; les photons perdus par réflexion (à la fenêtre de la cellule) et les photons transmis (à cause de l'absorption incomplète) ne sont pas pris en compte
- Dans EQE ; le contraire se produit.

$$EQE = SR(\lambda) \frac{hc}{q\lambda} \quad (\text{I-10})$$

$$IQE = \frac{EQE}{1-R} \quad (\text{I-11})$$

Où Q : la charge de l'électron et λ : la longueur d'onde.

I.6.5. Caractérisation (I-V) dans le cas idéal

Si la caractéristique de la jonction est de la forme [33]:

$$I = I_s (e^{\frac{qV}{nkT}} - 1) \quad (\text{I-12})$$

On peut admettre qu'en présence de lumière il y a apparition d'un photo-courant supplémentaire, I_{ph} dont le sens est opposé au courant direct. En branchant un circuit extérieur sur la cellule claire, on recueille ce courant. Le courant sous lumière vaut :

$$I = I_{ph} - I_s (e^{\frac{qV}{nkT}} - 1) \quad (\text{I-13})$$

La tension V est donnée par :

$$V = \frac{nkT}{q} \ln\left(\frac{I_{ph} + I_s}{I_s} - 1\right) \quad (\text{I-14})$$

I.6.6. Les types des pertes

L'équation de la caractéristique I-V de la cellule photovoltaïque compte tenu des résistances R_s , R_{sh} s'écrit donc [33]:

$$I(V) = I_{ph} - I_d - I_{sh} \quad (\text{I-15})$$

$$I(V) = I_{ph} - I_s \left(e^{\frac{q(V+R_s I)}{KT}} - 1 \right) - \frac{V + R_s I}{R_{sh}} \quad (\text{I-16})$$

Conclusion

A cause de l'importance de l'énergie dans notre vie quotidienne et ses sources importantes et notamment les sources renouvelables, de la quatrième colonne du tableau périodique et en particulier le silicium dans toutes ses formes : cristal, amorphe et couche minces jouent un grand rôle dans la technologie des semi-conducteurs et spécifiquement les applications photovoltaïques par ses excellentes propriétés physiques qui seront dévoilées et traitées dans le chapitre suivant.

Chapitre 2

Propriétés du matériau SiC, Modélisation et Outils de simulation

II.1. Introduction

Le silicium est le semi-conducteur le plus utilisé actuellement dans la technologie photovoltaïque grâce à ses propriétés distinguées comme la disponibilité et la maîtrise totale de gisement.

L'importance du silicium réside dans la facilité de le développer dans toutes les formes, cristallin, amorphe simple ou en composants binaires comme le carbure de silicium SiC qui sera notre composant semi-conducteur à étudier dans ce travail de thèse

Les semi-conducteurs binaires sont composés de deux atomes avec huit électrons de valence, la première observation de SiC remonte à Jons Jakob Berzelius, professeur de chimie à l'Institut Karolinska de Stockholm, en 1823, Berzelius a pu mettre un composé inconnu en teste et observait un nombre égal d'atomes de silicium (Si) et de carbone (C).

II.2. Les propriétés générales de carbure de silicium SiC:

Aujourd'hui, le SiC est devenu l'un des principaux concurrents parmi les semi-conducteurs à large bande interdite, cette caractéristique très importante est dû au:

- Les grands substrats de SiC sont disponibles et commercialisés.
- SiC peut être cultivé de manière homo-épitaxial en évitant le désaccord des réseaux,
- La conductivité de type N et P peut être obtenue soit par dopage pendant la croissance cristalline ou après par implantation ionique.
- Les films d'oxyde peuvent être développés thermiquement sur les faces Si et C.

Le SiC possède une série de propriétés physiques supérieures telles que:

- Une large bande interdite allant de 2,3 à 3,3 eV,
- Une intensité de champ électrique à la rupture de $EB = (0,8-3) \times 10^6 \text{ V / cm}$,
- Une vitesse de dérive de saturation de $v_s = 2 \times 10^7 \text{ cm / s}$.
- Une conductivité thermique de $K = 4,9 \text{ Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$.

Ces propriétés des matériaux favorisent l'application du SiC dans les appareils et les composant électroniques à haute température, haute puissance et haute fréquence.

II.2.1 les propriétés structurales du matériau SiC

La caractéristique intéressante du SiC est son apparence dans de nombreux poly-types différents, le SiC est composé de bicouches Si-C perpendiculaires à l'axe c (Fig. II-1). En fonction de la séquence d'empilement (pas à droite et à gauche), un poly-type cubique unique noté 3C- ou B-SiC, un grand nombre de poly-types hexagonaux marqués 2H-, 4H-, 6H-SiC etc., et un grand le nombre de poly-types rhomboédriques notés 15R-, 21R-, 27R-SiC etc. Au total, plus de 200 poly-types SiC différents sont identifiés par des motifs de Laue.[34].

Un poly-type déterminé contient N bicouches (plans) et ne différera des autres poly-types que par le détail de la séquence d'empilement des N plans successifs. Au total plus de 150 poly-types ont été identifiés.

Parmi ces poly-types, trois seulement présentent un intérêt pour les applications micro-électroniques :

- le 3C-SiC (poly-type cubique) pour le développement de capteur haute température,
- le 4H-SiC (poly-type à structure hexagonale) pour le développement de composants électroniques
- le 6H-SiC (poly-type à structure hexagonale) pour l'optoélectronique à base de nitrure.

Ces applications industrielles ne sont possibles que si l'on dispose de substrat de très haute qualité.[34]

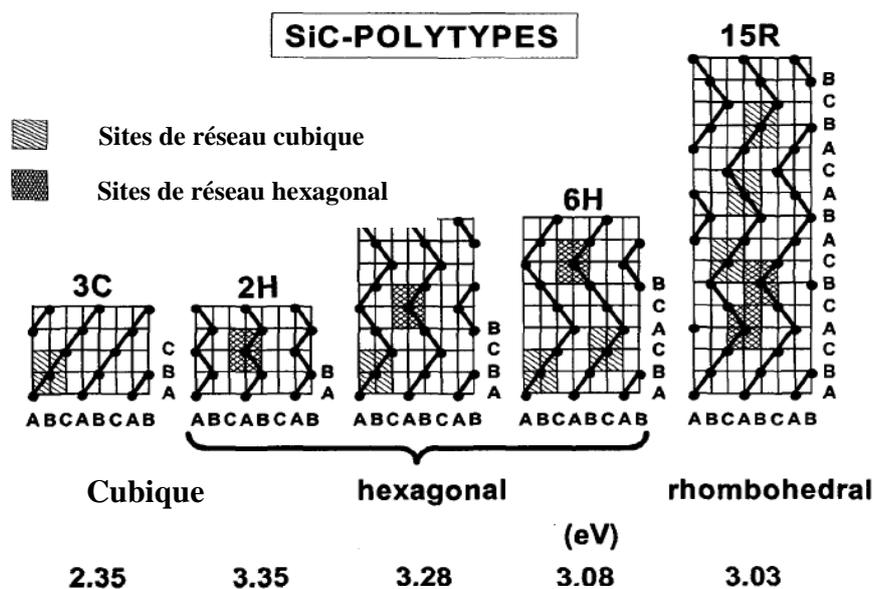


Figure II.1 Poly-types SiC; les sites ont indiqués schématiquement par les zones hachurées (k) et multi-hachurées (h)[36]

II.2.2 Propriétés électroniques

Tous les poly-types SiC sont des semi-conducteurs indirects où le maximum des bandes de valence supérieures est situé au centre (point Γ de la zone de Brillouin (BZ)).

En raison de la faible dispersion des bandes de conduction dans les SiC- 4H et 6H près de la limite de la BZ, il est difficile de positionner les minima de la bande de conduction dans les poly-types [38].

Le calcul ab-initio des propriétés de l'état fondamental de SiC hexagonal basé sur le concept de la théorie de la densité fonctionnelle (DFT) dans l'approximation de la densité locale (LDA), qui a récemment été réalisée par différents auteurs, s'accorde bien avec les détails des bandes internes [39].

Van Haeringen et al. ont discuté des raisons physiques de la forte variation de la bande interdite allant de 2,3 à 3,3 eV vis-à-vis des différents poly-types de SiC. [40] Les détails théoriques déduits des structures de bande d'énergie s'accordent avec les résultats expérimentaux. [41]

II.3 Critères de choix du matériau SiC pour les applications photovoltaïques

Le carbure de silicium est connu depuis 1907, lorsque le capitaine H. J. Round a démontré les émissions de jaune et de bleu en appliquant une polarisation entre une aiguille en métal et un cristal de SiC. En 1923, un scientifique russe, Oleg Losev, a découvert deux types de lumière émission de SiC - l'émission que nous appellerions maintenant la lumière "de pré-panne" et l'émission électroluminescente. Le potentiel d'utilisation du SiC dans l'électronique des semi-conducteurs était déjà reconnu il y a environ un demi-siècle. Les propriétés les plus remarquables du SiC sont [35] :

- Large bande interdite de 2,3 à 3,3 eV pour différents polytypes
- Très grand champ de rupture d'avalanche (2,5 - 5 MV/cm)
- Haute conductivité thermique (3 - 4,9 W/cm K)
- Température de fonctionnement maximale élevée (jusqu'à 1 000 ° C)

Presque tous les dispositifs fabriqués avec SiC peuvent être destinés aux applications à haute

II.3.1 Domaines d'application du carbure de silicium SiC

Depuis 1992 et l'utilisation du ZnS comme couche tampon [42], [43], de nombreux chercheurs travaillent sur le développement de la cellule CIGS sans utilisation de cadmium. Les couches tampons alternatives au CdS doivent remplir un certain nombre de spécificités l'un de ces derniers:

Une largeur de bande interdite, supérieure à celle du CdS (2,4 eV) et le carbure de silicium SiC c'est un matériau à large bande interdite avec des autres propriétés physiques importantes, afin de maximiser l'absorption de photons dans le CIGS.

De nombreuses applications électroniques et optoélectroniques basées sur les propriétés électroniques et optiques de base du SiC ont été proposées. Il existe cinq applications principales de matériaux à base de SiC[34]:

- Microstructures,
- Dispositifs optoélectroniques,
- Electronique à haute température,
- Electronique à rayonnement
- Appareils à haute puissance / haute fréquence.

Pour les applications de dispositifs optoélectroniques, le SiC n'est définitivement pas compétitif avec les alliages de nitrure. Cependant, des plaquettes de 6H-SiC sont actuellement utilisées comme substrat pour la production de diodes(Électroluminescentes lumineuses à base de nitrure).

Dans le cas des capteurs SiC ou MEMS (systèmes micro-électro-mécaniques), la solution idéale (en termes de marché et de coût de production) consiste à faire appel au développement de SiC cubique (3C) déposé sur Si. Afin de prendre en charge les 20% d'inadéquation nominale qui séparent les paramètres SiC et Si, [38-39].

Pour la fabrication des transistors métal-oxyde-semi-conducteur, des techniques industrielles sont nécessaires comme :

- Le dopage par les donneurs / accepteurs peu profonds en plus des porteurs de charge libres
- La diffusion des dopants,
- la conduction des impuretés,

- importance de la durée de vie des porteurs minoritaires et les propriétés des interfaces SiC / SiO₂.

II.4. Outils de simulation

II.4.1. Code Wien2k:

Différentes techniques de simulation sont disponibles, leurs objectifs permettent d'interpréter et de prédire des résultats expérimentaux. Le code Wien2k basé en général sur des méthodes *ab initio* basé sur le calcul des propriétés structurales, électroniques. Parmi les méthodes *ab initio*, la théorie de la densité fonctionnelle (DFT); une méthode appropriée à la modélisation des solides efficace pour la simplification drastique qu'elle apporte à la résolution de l'équation de Schrödinger, de même en trouve la méthode des ondes planes linéarisées (FP-LAPW) basée sur la DFT.

II.4.1.1 Equation de Schrodinger :

Conçue par le physicien autrichien Erwin Schrödinger en 1925, c'est une équation fondamentale en mécanique quantique, elle décrit l'évolution dans le temps d'une particule massive non relativiste, remplissant ainsi le même rôle que la relation fondamentale de la dynamique en mécanique classique. L'équation de Schrödinger apparaît comme un problème à part, assez délicat, puisqu'elle possède à la fois des aspects paraboliques et hyperboliques. [44].

Dans un système à plusieurs corps(M noyaux et N électrons), son évolution est décrit en mécanique quantique par une fonction d'onde Ψ satisfaisant à l'équation de Schrödinger [45] :

$$\mathbf{H}\Psi = \mathbf{E}\Psi \quad (\text{II. 1})$$

Où

H : représente l'hamiltonien du système cristallin

Ψ : sa fonction propre

E : l'énergie propre.

$$\mathbf{H} = \mathbf{T}_e + \mathbf{T}_n + \mathbf{V}_{ne} + \mathbf{V}_{ee} + \mathbf{V}_{nn} \quad (\text{II.2})$$

En l'absence du champ externe écrit l'hamilltonien :

$$\hat{\mathbf{H}} = \frac{-\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\Delta_{\vec{R}_i}^2}{M_i} - \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\Delta_{\vec{r}_i}^2}{m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2 Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2 Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} \quad (\text{II.3})$$

Où :

- M_i est la masse d'un noyau de coordonnées R_i
- m_e est la masse d'un électron de coordonnées r_i
- Le premier terme est l'opérateur d'énergie cinétique des noyaux, le des électrons,

- les derniers termes décrivent l'interaction Coulombienne entre électrons-noyaux et entre électrons-électrons et enfin entre noyaux-noyaux.

Dans cette expression T_n et T_e sont les opérateurs énergie cinétique des noyaux et des électrons qui s'expriment tout deux sous la forme de sommes de contributions individuelles :

$$T_n = \frac{-\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\Delta_{\vec{R}_i}^2}{M_n} \quad (\text{II.4})$$

$$T_e = \frac{-\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\Delta_{\vec{r}_i}^2}{m_e} \quad (\text{II.5})$$

Les opérateurs énergie potentielle : noyau-noyau, électron-noyau électron-électron sont les sommes des interactions coulombiennes entre particules chargées :

$$V_{n-n} = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2 Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} \quad (\text{II.6})$$

$$V_{n-e} = \frac{-1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2 Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{r}_j|} \quad (\text{II.7})$$

$$V_{e-e} = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (\text{II.8})$$

L'équation de Schrodinger pour N atomes contient $3(Z+1)N$ variables étant difficile à résoudre, ce qui nécessite des approximations simplificatrices dans un mode indépendant du temps [46-47].

II.4.1.2 Approximation de Born-Oppenheimer

Pour simplifier ce problème on utilise l'approximation de Born-Oppenheimer[48] qui considère les noyaux comme étant fixes par rapport aux électrons à cause de leur masse largement supérieure, ce qui mène à une énergie cinétique des noyaux nulle ($T_n=0$) et une 'énergie coulombienne (V_{nn}) de répulsion entre noyaux constante[49]. Ce qui donne :

$$H = T_e + V_{ee} + V_{en} \quad (\text{II.9})$$

ou bien

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\Delta_{\vec{r}_i}^2}{m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2 Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (\text{II.10})$$

Malgré ces simplifications, la résolution de cette équation reste extrêmement ardue car pour un système à n électrons elle dépend de $3n$ coordonnées d'espace; c'est la raison essentielle de la souvent couplée à l'approximation de Hartree [50].

II.4.1.3 Approximation de Hartree-Fock

En 1928, Hartree [51] fut le premier à proposer une approximation qui consiste à supposer que chaque électron se déplace de façon indépendante dans le champ moyen créé par les autres électrons et les noyaux, il propose une méthode permettant de calculer des fonctions d'ondes poly électroniques approchées sous la forme de produits de fonctions d'ondes mono-électroniques [52].

Cette approximation ramène donc le problème à N corps en interaction à celui d'un problème d'électrons indépendants, Ainsi écrit l'hamiltonien :

$$\mathbf{H} = \sum_i \mathbf{H}_i \quad (\text{II.11})$$

Ou' :

$$\mathbf{H}_i = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i + \mathbf{U}_i(\mathbf{r}_i) + \mathbf{V}_i(\mathbf{r}_i) \quad (\text{II.12})$$

$$\mathbf{U}_i(\mathbf{r}_i) = - \sum_k \frac{Z_k e^2}{4\pi |\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_k^0|}$$

\mathbf{U}_i : l'énergie potentielle de l'électron i dans le champ K

\mathbf{R}_k^0 : Il représente la position de nucléées

$\mathbf{V}_i(\mathbf{r}_i) = -\frac{1}{2} \sum_j \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$: Représente la latence effectif de Hartree

$$\text{Donc : } \mathbf{H}_i = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \mathbf{V}(\mathbf{r}) \quad (\text{II.13})$$

La fonction d'onde à N électrons $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ est séparable en un produit de fonctions d'ondes à un seul électron $\psi_i(\mathbf{r}_i)$:

$$\Psi = \Psi_1(\mathbf{r}_1) \cdot \Psi_2(\mathbf{r}_2) \cdot \Psi_3(\mathbf{r}_3) \dots \Psi_N(\mathbf{r}_N)$$

L'énergie totale du système est définie comme une fonctionnelle de la fonction d'onde $E = \sum \mathbf{E}_i$

Ainsi, l'équation de **Schrodinger des électrons** devient :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i + \mathbf{U}_i(\mathbf{r}_i) + \mathbf{V}_i(\mathbf{r}_i) \right] \Psi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \Psi_i(\mathbf{r}) \quad (\text{II.14})$$

Fock modifie l'approximation de Hartree [53], en introduisant le principe de spin à système d'électron, alors qu'il y a N! possibilités pour mettre N électrons sur N positions

La première possibilité est:

$$\Psi_1(\mathbf{r}_1) \cdot \Psi_2(\mathbf{r}_2) \cdot \Psi_3(\mathbf{r}_3) \dots \Psi_N(\mathbf{r}_N)$$

La deuxième possibilité est:

$$\Psi_1(\mathbf{r}_1) \cdot \Psi_3(\mathbf{r}_2) \cdot \Psi_2(\mathbf{r}_3) \dots \Psi_N(\mathbf{r}_N)$$

La fonction d'onde ψ peut être écrite comme un déterminant de Slater:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}_1) & \dots & \Psi_N(\mathbf{r}_1) \\ \Psi_1(\mathbf{r}_2) & \dots & \Psi_N(\mathbf{r}_2) \\ \dots & \dots & \dots \\ \Psi_1(\mathbf{r}_N) & \dots & \Psi_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix} \quad (\text{II.15})$$

Les spins orbitales $\Psi_i(\mathbf{r}_i)$ sont les solutions d'un système d'équations différentielles couplées, dites équations de Hartree-Fock :

$$E_{HF}(\mathbf{r}) = \langle \Psi_{el}(\{\mathbf{r}\}) | H | \Psi_{el}(\{\mathbf{r}\}) \rangle = \sum_i H_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} (J_{ij} - K_{ij}) \quad (\text{II.16})$$

Le terme J_{ij} est l'intégrale de Coulomb.

K_{ij} est l'intégrale d'échange ou terme de Fock.

Pour déterminer les fonctions $\psi_i(\mathbf{r})$, on utilise le principe de minimisation de Rayleigh-Ritz pour l'énergie $E_{HF}(\mathbf{r})$, avec une contrainte de normalisation des fonctions d'onde.

$$\delta(E_{HF}(\mathbf{r}) - \sum_{i,j} \lambda_{ij} (\langle \Psi_i | \Psi_j \rangle - \delta_{ij})) = 0 \quad (\text{II.17})$$

II.4.1.4 Théorie de la densité fonctionnelle (DFT):

Théorie de la Densité Fonctionnelle ou DFT (Density Functional Theory) constitue actuellement l'une des méthodes les plus utilisées dans les calculs quantiques de la structure électronique de la matière (atomes, molécules, solides), la DFT trouve ses origines dans le modèle développé par Lewellyn Thomas et Enrico Fermi à la fin des années 1920 [54].

L'objectif principal de la (DFT) est de remplacer la fonction d'onde multiélectronique qui dépend de $3N$ variables (N est le nombre total de particules du système) par la densité électronique est seulement fonction de trois variables, il s'agit donc d'une quantité plus facile à traiter tant mathématiquement que conceptuellement.

Le principe de la (DFT) consiste en une reformulation du problème quantique à N corps en un problème mono corps. La théorie DFT a été à l'origine principalement développée dans le cadre de la théorie quantique non-relativiste (équation de Schrödinger indépendante du temps) et dans l'approximation de Born-Oppenheimer.

En 1964 la DFT a été relancée par Hohenberg-Kohn [55] et Kohn-Sham [56], ils ont traité le problème à N corps à l'aide des équations type Schrödinger à une seule particule nommées les équations de Kohn-Sham avec but principal de modéliser l'interaction électron-électron,

elle décrit aussi le comportement des électrons fortement liés en présence du champ électrostatique des ions. Dans cette théorie totale des électrons, la DFT est considérée comme des densités électroniques construites à partir des fonctions d'onde d'un électron (LDA) [57-58].

II.4.1.5. Théorèmes de Hohenberg et Kohn

Le formalisme de la théorie de la densité fonctionnelle (DFT) est basé sur les deux théorèmes de Hohenberg et Kohn [59] :

La densité électronique $\rho(\mathbf{r})$ est la seule fonction nécessaire pour obtenir toutes les propriétés électroniques d'un système quelconque :

$$E = E(\rho) \quad (\text{II.18})$$

En d'autres termes, il existe d'une correspondance biunivoque entre la densité électronique de l'état fondamental.

$$E(\rho_0) = \text{Min } E(\rho) \quad (\text{II.19})$$

Alors que nous exprimons la fonction d'énergie :

$$E(\rho) = \langle \Psi | H | \Psi \rangle \quad (\text{II.20})$$

Ψ : est une densité fonctionnelle, et par suite T et V_{ee} le sont aussi, alors Hohenberg et Kohn ont défini la fonctionnelle universelle, vraie pour n'importe quel nombre de particules et n'importe quel potentiel extérieur $V(r)_{ext}$ définie par:

$$F[n(\mathbf{r})] = \langle \Psi | T + V_{ee} | \Psi \rangle \quad (\text{II.21})$$

$$F[n(\mathbf{r})] = T[n(\mathbf{r})] + V_{ee}[n(\mathbf{r})] \quad (\text{II.22})$$

A l'aide de cette fonctionnelle, ils définissent pour un potentiel donné, la fonctionnelle d'énergie :

$$E[n(\mathbf{r})] = \int V_{ext}(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + F[n(\mathbf{r})] \quad (\text{II.23})$$

II.4.1.6 Les équations de Kohn-Sham.

En 1965 Kohn et Sham [56] présentaient la densité électronique comme étant la somme des densités des particules libres en utilisant le principe vibrationnel pour obtenir l'énergie de l'état fondamental et la densité de la fonctionnelle $E_{xc}[\rho]$.

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum \Psi_i^*(\mathbf{r}) \Psi_i(\mathbf{r}) \quad (\text{II.24})$$

La densité de probabilité est donnée par la présence expédition par :

$$E_e = T + V \quad (\text{II.25})$$

$$E_{H.F} = T_0 + (V_H + V_x) \quad (\text{II.26})$$

Où :

T : énergie cinétique du système avec interaction

V : le terme de l'interaction électrons-électrons

T₀ : énergie cinétique du système sans interaction

V_H : désigne le terme Hartree (l'interaction de Coulomb classique entre les électrons).

V_x : le terme qui comprend les effets de l'échange et de la corrélation (V_x=V-V_h)

V_c : le terme Lien Électrons : V_c=T-T

Donc :

$$F_{H,K} = T + V + T_0 - T_0 = T_0 + V_H + (V_x + V_c) \quad (\text{II.27})$$

V_{xc} = V_x + V_c : le terme d'échange et de corrélation,

la fonction d'énergie totale est :

$$E(\rho) = T_0(\rho) + V_H + V_{xc} + V_{ext}(\rho) \quad (\text{II.28})$$

V_{ext}: inclut l'interaction coulombienne des électrons avec les noyaux et entre noyaux eux même.

Le terme de Hartree et celui de l'énergie cinétique jouent un rôle important dans la description des états des électrons libres. Ces termes sont les plus importants dans la description des états des électrons libres. La différence entre l'énergie cinétique réelle et celle des électrons non interagissant ainsi que la différence entre l'énergie d'interaction réelle et celle de Hartree sont prises en compte dans l'énergie d'échange et de corrélation V_{xc}[ρ].

L'équation de Kohn-Sham est :

$$(T + V_{ei}(r) + V_H(r) + V_{xc}(r))\phi_i(r) = \epsilon_i \phi_i(r) \quad (\text{II.29})$$

Solution de l'équation de Kohn-Sham :

Pour calculer la structure de bande d'énergie, on utilise la méthode DFT. Kohn et Sham[58], ont décrit la densité électronique comme une somme de densités à une particule ce qui permet de mettre les orbitales de Kohn-Sham sous la forme :

$$\Psi_i(r) = \sum C_{i\alpha} \phi_\alpha(r) \quad (\text{II.30})$$

Où ϕ_α sont les fonctions de base et $C_{m\alpha}$ les coefficients du développement.

La solution de l'équation de Kohn-Sham dépend des coefficients $C_{m\alpha}$ qui optimisent l'énergie ce qui nécessite de résoudre l'équation séculaire d'une manière auto-cohérente (Figure II-1) jusqu'à la minimisation de l'énergie totale :

$$(H - \epsilon_i O) C_i = 0 \quad (\text{II.31})$$

H: hamiltonien de Kohn-Sham,

O : matrice de recouvrement

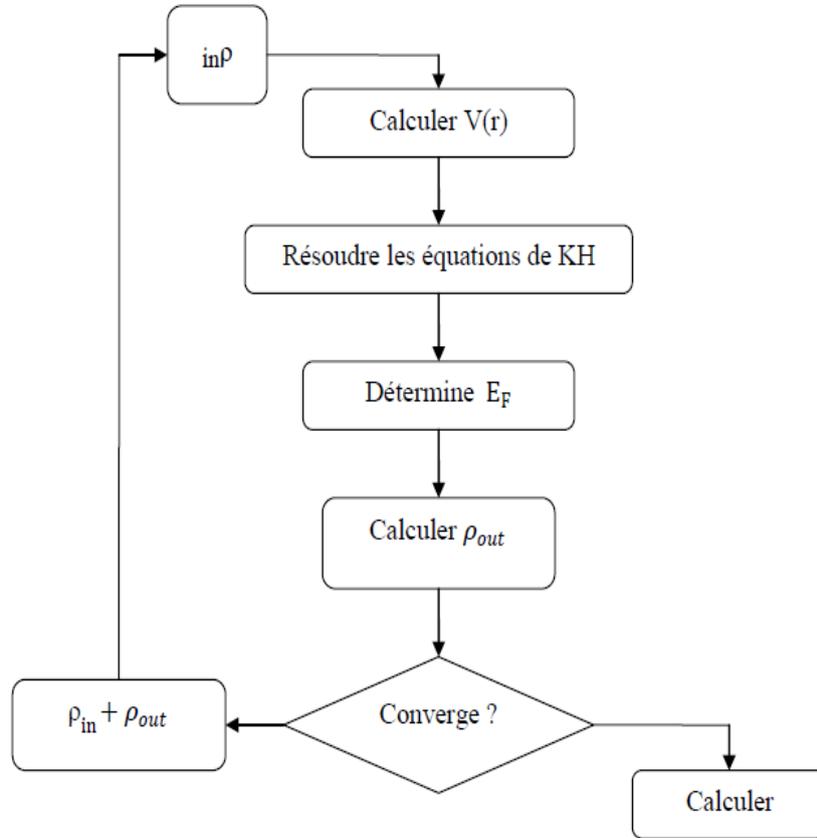


Figure II.2 : Cycle auto cohérent de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

Pour la résolution de l'échange et de corrélation, Il existe deux approximations très courantes pour traiter le terme V_{xc} , où :

$$V_{xc} = \frac{\partial E_{xc}[\rho]}{\partial n(r)} \quad (\text{II.32})$$

II.4 .1.7 Approximation de la densité locale(LDA):

L'approximation de la densité locale (Local Density Approximation LDA) est fondée sur le modèle du gaz uniforme d'électron et constitue l'approche la plus simple pour exprimer l'énergie d'échange-corrélation décrite comme suit :

$$E_{xc}^{LDA}[\rho(r)] = \int \rho(r) \epsilon_{xc}^{LDA}[\rho(r)] d^3r \quad (\text{II.33})$$

Où

$\epsilon_{xc}^{LDA}[\rho(\mathbf{r})]$: est l'énergie d'échange et de corrélation par corrélation par particule du gaz d'électrons uniforme.

$\epsilon_{xc}^{LDA}[\rho(\mathbf{r})]$: considérée comme la somme d'une contribution d'échange et de corrélation :

$$\epsilon_{xc}[\rho(\mathbf{r})] = \epsilon_x[\rho(\mathbf{r})] + \epsilon_c[\rho(\mathbf{r})] \quad (\text{II.34})$$

En utilisant des unités atomiques :

$$\epsilon_x = -0.4582 / r_s \quad (\text{II.35})$$

L'énergie d'échange :

$$\epsilon_c = -0.44 / r_s + 7.8 \quad (\text{II.36})$$

et L'énergie de corrélation :

$$\rho = (4\pi r_s^3 / 3)^{-1} \quad (\text{II.37})$$

La fonctionnelle ϵ_{xc} peut être constante, mais généralement, elle est déterminée par des procédures de paramétrage comme celles de Ceperly, Alder Hedin, Lundqvist [59], Perdew et Wang [60].

L'approximation LDA peut être formulée de manière plus générale en prenant en compte le spin de l'électron dans l'expression de la fonctionnelle, on parle alors d'approximation LSDA (pour local spin density approximation) où l'énergie d'échange et de corrélation est fonctionnelle des deux densités de spin, haut et bas :

$$E_{xc}^{LSDA}[\rho_\uparrow, \rho_\downarrow] = \int \rho(\mathbf{r}) \epsilon_{xc}[\rho_\uparrow(\mathbf{r}), \rho_\downarrow(\mathbf{r})] d^3r \quad (\text{II.38})$$

La densité d'électrons :

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum \Psi_i^*(\mathbf{r}) \Psi_i(\mathbf{r}) \quad (\text{II.39})$$

II.4.1.8 Approximation du gradient généralisé (GGA):

L'approximation dite du gradient généralisé revient à considérer le terme d'échange et de corrélation non plus comme une fonction uniquement de la densité mais de manière plus générale comme une fonction de la densité et de sa variation locale, l'énergie d'échange-corrélation est définie dans l'approximation GGA par :

$$E_{xc}^{GGA}[\rho] = \int f(\mathbf{r}) [\rho(\mathbf{r}), \nabla\rho(\mathbf{r})] d^3r \quad (\text{II.40})$$

$[\rho(r), \nabla\rho(r)]$ étant la fonction d'échange-corrélation dépendante de la densité électronique et son gradient, tenant compte du spin, l'équation (II.40) devient:

$$E_{xc}^{GGA}[\rho_{\uparrow}, \rho_{\downarrow}] = \int d^3r f[\rho_{\uparrow}, \rho_{\downarrow}, \nabla\rho_{\uparrow}, \nabla\rho_{\downarrow}] \quad (II.41)$$

II.4.1.9 Approximation MBJ:

Tran et Blaha proposent une version modifiée de la fonctionnelle de Becke et Johnson, dite MBJ, qui a prouvé rapidement son efficacité par rapport aux modes de calcul les plus souvent utilisés tel que LDA [60] et GGA [61], sous la forme :

$$v_{x;\sigma}^{MBJ}(\mathbf{r}) = cv_{x;\sigma}^{BR} + (3c - 2) \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{5}{12}} \sqrt{\frac{2t_{\sigma}(\mathbf{r})}{\rho_{\sigma}}} \quad (II.42)$$

Avec:

$$\rho_{\sigma} = \sum_{i=1}^{N_{\sigma}} |\Psi_{i,\sigma}|^2 \quad \text{:la densité électronique ;}$$

$$t_{\sigma}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_{\sigma}} |\Psi_{i,\sigma}^* \nabla \Psi_{i,\sigma}|^2 \quad \text{:la densité d'énergie cinétique ;}$$

$$v_{x;\sigma}^{RB}(\mathbf{r}) \quad \text{le potentiel de becke-Roussel.}$$

La forme proposée pour c est la suivante :

$$c = \alpha + \beta \left(\frac{1}{V_{cell}} \int_{cell} \frac{|\nabla\rho(r')|}{\rho(r')} d^3r' \right)^{1/2} \quad (II.43)$$

α et β sont deux paramètres libres, V_{cell} le volume de la cellule unitaire du système

II.4.1.10 La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW)

La méthode APW : La méthode des ondes planes augmentées (APW) [62] a été développée par Slater en 1937 [63]. Puis Anderson montre que la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) est pour améliorer la méthode APW dont l'idée principale est décrite comme suit:

Au voisinage d'un noyau atomique, le potentiel et les fonctions d'onde sont de la forme «Muffin-Tin » (MT) présentant une symétrie sphérique à l'intérieur de la sphère MT de rayon R_{α} divisant l'espace entourant les atomes en deux zones, figure II,3 :

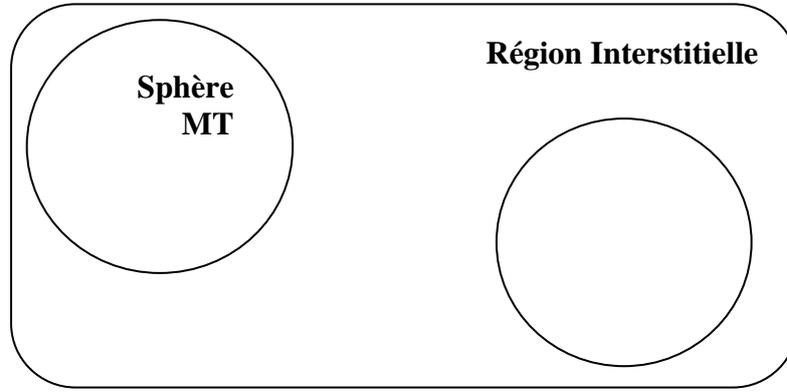


Figure II.3 : Potentiel « Muffin-Tin » (MT)

La première zone à l'intérieur du sphère M.T, contient à la fois des noyaux et des électrons étroitement liés.

La deuxième zone est une région entourant les sphères où l'espace restant à l'extérieur de ces sphères appelé : région interstitielle ce qui permet d'écrire la fonction d'onde $\phi(r)$ de la manière suivante:

$$\phi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^{1/2}} \sum_G \mathbf{C}_G e^{i(\mathbf{G}+\mathbf{K})\mathbf{r}} & r > R_\alpha \\ \sum_{lm} A_{lm} U_l(r) Y_{lm}(\mathbf{r}) & r < R_\alpha \end{cases} \quad (\text{II.44})$$

Où

R_α : représente le rayon de la sphère MT,

Ω : le volume de la cellule,

CG et A_{lm} : les coefficients du développement.

La fonction $U_l(r)$ est une solution régulière de l'équation de Schrödinger pour la partie radiale de forme :

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r U_l(r) = 0 \quad (\text{II.45})$$

$V(r)$ représente le potentiel Muffin-Tin et E_l l'énergie de linéarisation. Les fonctions radiales définies par (2.2) sont orthogonales à tout état propre du cœur. Cette orthogonalité disparaît en limite de sphère comme le montre l'équation de Schrödinger

$$(E_2 - E_1) r U_1 U_2 = U_2 \frac{d^2 U_1}{dr^2} - U_1 \frac{d^2 U_2}{dr^2} \quad (\text{II.46})$$

Où U_1 et U_2 sont des solutions radiales pour les énergies E_1 et E_2 . Pour assurer la continuité de fonction $\phi(r)$ à la surface de la sphère MT, les coefficients A_{lm} doivent être développés en fonction des coefficients CG des ondes planes existantes dans les régions interstitielles. Ainsi, après quelques calculs algébriques, nous trouvons que :

$$A_{lm} \frac{4\pi i^l}{\Omega^2 U_l(R_\alpha)} \sum_G C_G j_l(|\mathbf{K} + \mathbf{g}| R_\alpha) Y_{lm}^*(\mathbf{K} + \mathbf{G}) \quad (\text{II.47})$$

L'origine est prise au centre de la sphère, et les coefficients A_{lm} sont déterminés partir de ceux des ondes planes C_G . Les paramètres d'énergie E_l sont appelés les coefficients variationnels de la méthode APW. Les fonctions individuelles, étiquetées par G deviennent ainsi compatibles avec lesLa méthode APW, ainsi construite, présente quelques difficultés liées à la fonction $U_l(R_\alpha)$ qui apparaît au dénominateur de l'équation (2.4). En effet, suivant la valeur du paramètre E_l , la valeur de $U_l(R_\alpha)$ peut devenir nulle à la surface de la sphère MT, entraînant une séparation des fonctions radiales par rapport aux fonctions d'onde plane. Afin de surmonter ce problème, plusieurs modifications à la méthode APW ont été apportées, notamment celles proposées par Koelling [65] et par Andersen [64]. La modification consiste à représenter la fonction d'onde $\phi(r)$ à l'intérieur des sphères par une combinaison linéaire des fonctions radiales $U_l(r)$ et de leurs dérivées par rapport à l'énergie $\dot{U}_l(r)$, donnant ainsi naissance à la méthode FP-LAPW

II.4.1.11 Principe de la méthode FP-LAPW :

En 1975, Anderson [67] a proposé la méthode des ondes planes augmentées et linéarisées (LAPW). Dans le cas de la méthode LAPW, les fonctions de base à l'intérieur de la sphère muffin-tin sont une combinaison linéaire des fonctions radiales $U_l(r) Y_{lm}(r)$ et de leurs dérivées par rapport à l'énergie $\dot{U}_l Y_{lm}(r)$. Les U_l sont définies comme dans la méthode APW, Et la fonction $\dot{U}_l(r) Y_{lm}(r)$ est soumise à la condition suivante :

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r \dot{U}_l(r) = r U_l(r) \quad (\text{I.49})$$

Dans le cas non relativiste, les fonctions $U_l(r), \dot{U}_l(r)$ garantissent la continuité sur la surface de la sphère M.T, donc les fonctions de base sont alors données par :

$$\phi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^{1/2}} \sum_G C_G e^{i(\mathbf{G}+\mathbf{K})\cdot\mathbf{r}} & \mathbf{r} \in \mathbf{I} \\ \sum_{lm} [A_{lm} U_l(r) + B_{lm} \dot{U}_l(r)] Y_{lm}(\mathbf{r}) & \mathbf{r} \in \mathbf{S} \end{cases} \quad (\text{I.50})$$

Où les coefficients B_{lm} correspondent à la fonction $\dot{U}_l(r)$ et sont de même nature que les coefficients A_{lm} .

Les fonctions LAPW sont des ondes planes uniquement dans les zones interstitielles comme dans la méthode APW. A l'intérieur des sphères. Les fonctions LAPW sont mieux adaptées

que les fonctions APW. En effet, si E_l diffère un peu de l'énergie de bande E , une combinaison linéaire reproduira mieux la fonction radiale que les fonctions APW constituées d'une seule fonction radiale. Par conséquent, la fonction U_l peut être développée en fonction de sa dérivée \dot{U}_l et de l'énergie E_l .

$$U_l(\epsilon, \mathbf{r}) = U_l(E_l, \mathbf{r}) + (\epsilon - E_l)\dot{U}_l(\epsilon, \mathbf{r}) + O((\epsilon - E_l)^2) \quad (\text{I.51})$$

$O((\epsilon - E)^2)$ est l'erreur quadratique.

La méthode LAPW assure ainsi la continuité de la fonction d'onde à la surface de la sphère de MT.

II.4.1.12 Les rôles des énergies de linéarisation (E_l):

Les fonctions U et \dot{U} sont orthogonales à n'importe quel état de coeur strictement limité à la sphère MT, mais cette condition n'est satisfaite que dans le cas où il n'y a pas d'états de coeur avec le même l , et par conséquent, on prend le risque de confondre les états de semi-coeur avec les états de valence. Ce problème n'est pas traité par la méthode APW alors que la non orthogonalité de quelques états de coeur dans la méthode FP-LAPW exige un choix délicat de E_l , dans ce cas, on ne peut pas effectuer le calcul sans modifier E_l .

La solution idéale dans de tels cas, est d'utiliser un développement en orbitales locales. Cependant, cette option n'est pas disponible dans tous les programmes et le choix d'un rayon de la sphère le plus grand possible pour la sphère M.T est nécessaire.

Finalement, il faut remarquer que les divers E_l devraient être définis indépendamment les uns des autres, les bandes d'énergie ont des orbitales différentes.

Pour un calcul précis de la structure électronique, E_l doit être choisi le plus proche possible de l'énergie de la bande si la bande a le même l .

II.4.1.13 La base LAPW avec les orbitales locales (LAPW+LO)

Afin de développer la méthode LAPW en orbitales locales, on change l'orbite de sa base et on évite l'utilisation de nombreuses fenêtres. Donc nous utilisons une troisième catégorie de fonctions de base. Plusieurs propositions ont été faites par Takeda, Smocké Petru et Schanghnessy. Récemment Singha a proposé une technique alternative en introduisant un troisième genre de fonctions de base.

Une orbitale locale est définie comme suit :

$$\phi_{lm} = [A_{lm}U_l(\mathbf{r}, E_{1,l}) + B_{lm}\dot{U}_l(\mathbf{r}, E_{1,l}) + C_{lm}U_l(\mathbf{r}, E_{2,l})]Y_{lm}(\mathbf{r}) \quad \mathbf{r} < R_\alpha \quad (\text{II.5})$$

Où les coefficients C_{lm} , A_{lm} et B_{lm} sont déterminés tels que le "lo" soit normalisé, et a la valeur nulle et une pente nulle à la frontière de la sphère muffin-tin.

Méthode APW+lo

Sjösted, Nordström et Singh [68] ont apporté une amélioration en réalisant une base qui combine les avantages de la méthode APW et ceux de la méthode LAPW+LO. Cette méthode est appelée «APW+lo», afin d'éviter le problème de la méthode APW était la dépendance en énergie de l'ensemble des fonctions de base.

Dans cette méthode, l'ensemble des fonctions de base sera indépendant en énergie et toujours avec la même taille que celui de la méthode APW. Dans ce sens, APW+Lo combine les avantages de la méthode APW et ceux de la méthode LAPW+Lo.

La base APW+lo contient deux types de fonctions. Le premier étant les APW's, avec un ensemble d'énergies fixées E_l :

$$\phi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^{1/2}} \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{G}+\mathbf{K}) \cdot \mathbf{r}} & \mathbf{r} > R_{\alpha} \\ \sum_{lm} A_{lm} U_l(\mathbf{r}) Y_{lm}(\mathbf{r}) & \mathbf{r} < R_{\alpha} \end{cases} \quad (\text{II. 53})$$

Le deuxième type de fonctions sont des orbitales locales (lo) différentes de celle de la méthode LAPW+Lo, définies par :

$$\phi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \mathbf{0} & \mathbf{r} > R_{\alpha} \\ A_{lm} U_l(\mathbf{r}, E_l) + B_{lm} \dot{U}_l(\mathbf{r}, E_l) Y_{lm}(\mathbf{r}) & \mathbf{r} < R_{\alpha} \end{cases} \quad (\text{II.54})$$

Les deux coefficients et sont déterminés par normalisation en considérant que l'orbitale locale ait une valeur zéro en bord de sphère *muffin tin*.

II.4.1.14 Le concept de la méthode FP-LAPW :

Dans la méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total (Full Potential Linearized Augmented Plane Waves : FP-LAPW) [69], est basée sur la résolution auto-cohérente des équations de Khon-Sham dans deux région arbitrairement définies de la maille élémentaire, la région I étant formée de sphères atomiques de rayon arbitraire R_{mt} ($mt = \text{muffin tin}$), et la région II de l'espace interstitiel entre les sphères .Ils sont plutôt développés en des harmoniques du réseau à l'intérieur de chaque sphère atomique, et en des séries de Fourier dans les régions interstitielles.

Cette méthode assure donc la continuité du potentiel à la surface de la sphère MT et le développe sous la forme suivante :

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} \sum_{lm} V_{lm}(\mathbf{r}) Y_m^l(\omega) & \mathbf{r} \in S_\alpha \\ \sum_{\vec{k}} V_{\vec{k}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) & \mathbf{r} \in I \end{cases} \quad (\text{II.55})$$

De la même manière, la densité de charge est développée sous la forme :

$$\rho(\mathbf{r}) = \begin{cases} \sum_K \rho_K e^{iK\mathbf{r}} & \mathbf{r} > R_\alpha \\ \sum_{lm} \rho_{lm}(\mathbf{r}) Y_{lm}(\mathbf{r}) & \mathbf{r} > R_\alpha \end{cases} \quad (\text{II.56})$$

Le potentiel $V(\mathbf{r})$ et la densité de charge $\rho(\mathbf{r})$ sont décrits par des séries de fonctions radiales pour les régions I et d'ondes planes pour la région II.

II.4. Le Code Wien2k

Dans cette partie, la méthode FP-LAPW est implémentée dans le code Wien2k [66,67], ce dernier un ensemble de programmes élaborés par Blaha, Schwarz et leurs collaborateurs, la figure II.4 résume le fonctionnement et la structure du code *Wien2k*. La procédure de calcul passe par trois étapes:

- 1. Initialisation:** La première étape de calcul qui consiste une série de petits programmes auxiliaires, la configuration spatiale (géométrie), les opérations de symétrie, les densités de départ, le nombre de points spéciaux nécessaires à l'intégration dans la zone irréductible de Brillouin...etc . Les différents programmes qui s'exécutent lors d'un calcul autocohérent sont :

NN : donne les distances entre plus proches voisins et aide à déterminer le rayon de la sphère muffin-tin.

SGROUP : détermine le groupe spatial (space group) de la structure .

LSTART : génère les densités atomiques et détermine comment les différentes orbitales sont traitées dans le calcul de la structure de bande (c'est à dire états de cœur et états de valence, avec ou sans orbitales locales ...).

SYMMETRY : est un programme qui génère les opérations de symétrie du groupe spatial, et détermine le groupe ponctuel des différents emplacements atomiques, détermine le groupe ponctuel des sites atomiques individuels, et détermine les matrices de rotation locale.

KGEN : génère une maille k dans la zone de Brillouin.

DSTART : génère une densité électronique des atomes libres de départ pour le cycle SCF ,et produit des densités électroniques des atomes libres et détermine comment les différentes orbitales seront traitées dans les calculs de structure de bande.

- 2. Calcul SCF :** Le cycle SCF comprend les étapes suivantes :

LAPW0 : génère le potentiel à partir de la densité.

LAPW1 : calcule les bandes de valence (les valeurs propres et les vecteurs propres)

LAPW2 : calcule les densités de valence à partir des vecteurs propres.

LCORE : calcule les états de coeur et les densités.

MIXER : mélange les densités de valence et du coeur pour produire la nouvelle densité.

2. Calcul des propriétés : le calcul des propriétés physiques se fait à l'aide des fonctions :

OPTIMISE : détermination de l'énergie totale en fonction du volume qui sert à calculer le paramètre du réseau, le module de compressibilité et sa dérivée.

TETRA : calcul de la densité d'état totale et partielle.

SPAGHETTI : calcul de la structure de bandes en utilisant les valeurs propres générées par LAPW1.

OPTIC : calcul des propriétés optiques.

XSPEC : calcul des structures des spectres d'absorption et émission des rayons X

II.3. Modélisation et simulation numérique des cellules solaires

Les modèles numériques sont devenus des outils indispensables à la conception de tout type de cellules solaires efficaces. Ils ont grandement contribué à notre compréhension du fonctionnement des cellules et sont nécessaires à de futures améliorations. Ce virage vers les techniques de solutions numériques a éliminé la nécessité de faire des hypothèses de simplification.

Le premier travail de simulation numérique ADEPT a été développé par Lee lié aux cellules solaires, Lee et Gray ont examiné les effets de la non-idéalité de contact par influence des joints de grains et la détermination d'un ensemble de paramètres cohérents de la cellule avec une performance.

Plusieurs programmes de simulation de cellules solaires sont actuellement disponibles, Mark S. Lundstrom a développé le premier programme de simulation de cellules solaires dans le cadre de sa thèse de doctorat. Autres programmes de simulation de semi-conducteurs à couches minces comme : (TFSSP), (SCAPS 1D), (SCAP 2D), PUPHS, et PUPHS2D.

Dans ce travail de thèse d'état une simulation unidimensionnelle par SCAPS-1D a été adoptée pour étudier et analyser des cellules solaires à couche mince CdS / CdTe et nw-CdS / CdTe.

SCAPS-1D développé au département d'électronique et des systèmes d'information (ELIS) de l'Université de Gent, Belgique. Au début, SCAPS était pour les structures cellulaires du CuInSe₂ et du CdTe famille puis plusieurs extensions ont cependant amélioré ses capacités

afin qu'il soit également applicables aux cellules solaires cristallines (familles Si et GaAs) et aux cellules amorphes (a-Si et Si micro-morphe) [70].

Dans SCAPS-1D, l'ajout de sept couches de semi-conducteurs et la modification de tous les paramètres presque sont possibles. Des paramètres tels que la bande interdite et la mobilité sont indépendants de la température, on peut définir jusqu'à trois niveaux profonds pour chaque couche et trois états d'interface peuvent être placés entre ces trois couches. Ces niveaux profonds peuvent être répartis énergétiquement dans la zone interdite (niveau unique, uniforme, gauss ou queue exponentielle). Les niveaux massifs profonds peuvent également varier spatialement à l'intérieur de la couche (uniforme, pas à pas, linéaire ou exponentielle), toutes les autres propriétés sont spatialement uniformes pour Chaque couche. Ainsi, afin d'introduire les jonctions graduées dans l'appareil, plusieurs couches doivent être utilisés.

Les contacts avant et arrière peuvent être définis et la création de tunnels est aussi possible, Pour l'éclairage, une variété de spectres standard et autres sont inclus, tels que AM₀, AM_{1.5D}, AM_{1.5G}, AM_{1.5} Gediton2, monochromatique, blanc, etc, l'éclairage peut être du côté P ou du côté N.

Dans le SCAPS, la possibilité de calcul est largement étendue aux différents paramètres comme la tension, la fréquence et la température, les bandes d'énergie, les concentrations et les courants. La simulation numérique permet d'illustrer les caractéristiques J, les caractéristiques alternatives (C et G en fonction de V et / ou f), la réponse spectrale (également avec lumière ou tension de polarisation).

Le programme est organisé en plusieurs modules et menus, dans lesquels l'utilisateur peut définir des paramètres ou en quels résultats sont montrés.

Un langage de script incluant une fonction utilisateur gratuite donne une interface utilisateur très intuitive. Un script La fonctionnalité de langage est ajouté pour exécuter SCAPS-1D à partir d'un "fichier script" et toutes les variables internes peuvent être accessibles et tracés via le script. SCAPS-1D possède une fonction d'ajustement de courbe intégrée et un champ pour l'interprétation des mesures d'admittance

II.3.1 Modélisation de la cellule solaire

En principe, tout programme numérique capable de résoudre les équations de base des semi-conducteurs pourrait être utilisé pour la modélisation de cellules solaires en couches minces. Les équations de base sont les suivantes : densité actuelle les équations, l'équation de Poisson reliant la charge au potentiel électrostatique et l'équation de continuité pour électrons et trous.

II .3.1.1. Équations de densité de courant

La conduction de courant comprend principalement deux composants, à savoir le composant de dérive, qui est causée par le champ électrique et la composante de diffusion, qui est causée par le porteur le gradient de concentration. Celles-ci sont également appelées équations constitutives [70]. Les équations sont les suivantes :

$$J_n = q\mu_n n\mathcal{E} + qD_n \frac{dn}{dx} = q\mu_n \left(n\mathcal{E} + \frac{kT}{q} \frac{dn}{dx} \right) = \mu_n n \frac{dE_{Fn}}{dx}$$

$$J_p = q\mu_p p\mathcal{E} + qD_p \frac{dp}{dx} = q\mu_p \left(p\mathcal{E} + \frac{kT}{q} \frac{dp}{dx} \right) = \mu_p p \frac{dE_{Fp}}{dx}$$
(II.57)

où,

dE champ électrique

μ_n, μ_p - Mobilité de l'électron et du trou respectivement

J_p - densité de courant d'électrons et de trous respectivement

D_n , coefficient-coefficient de diffusion pour électrons et trous, respectivement

E_{Fn}, E_{Fp} - niveau de Quasi-Fermi pour électron et trou

II .3.1.2 Equation de la continuité

Dans les semi-conducteurs, il existe divers mécanismes de transport de porteurs, les équations de continuité incluent les phénomènes dépendant du temps tels que la génération, la recombinaison et les faibles niveaux injection, effet de la dérive, de la diffusion, de la génération thermique indirecte ou directe ou de la recombinaison provoquer la modification de la concentration de porteurs en fonction du temps. Le changement net de transporteur de la concentration est la différence entre la génération et la recombinaison, plus le courant net entrant et sortant de la région spécifiée.

Les équations de continuité sont données par [71]:

$$-\frac{\partial J_n}{\partial x} - U_n + G = \frac{\partial n}{\partial t}$$
(II.58)

$$-\frac{\partial J_p}{\partial x} - U_p + G = \frac{\partial p}{\partial t}$$
(II.59)

Où, G : Taux de génération

U_p -N Taux de recombinaison / génération de Un ,

II .3.1.1.3 Equation de poisson

L'équation de Poisson donne le point de départ pour obtenir la solution qualitative des variables électrostatiques dans un semi-conducteur. Il est donné par [72],

$$\frac{\partial}{\partial x}(\epsilon_0 \epsilon \frac{\partial \psi}{\partial x}) = -q(p - n + N_D - N_A) \quad (\text{II.60})$$

Où :

q (- $n + N_D - N_A$) = ρ (densité de charge), en considérant les dopants comme étant complètement ionisés. , N_A : Concentration en impuretés donneur et accepteur, respectivement.

II .3.2 Modèle physique

II .3.2.1 Niveaux de vrac profond (Deep bulk levels)

Dans chaque couche, le type (donneur ou accepteur) et la densité d'un niveau peu profond peuvent être définis ; la particule est complètement ionisée et ne contribue pas à la recombinaison, aussi, jusqu'à trois niveaux profonds peuvent être définis. La recombinaison dans ces niveaux et leur occupation, est décrite par le formalisme de Shockley-Read-Hall (SRH) et la charge est définie par l'occupation du niveau et de son type (donneur ou accepteur, ou "neutre", c'est-à-dire une hypothèse centre sans frais). Les niveaux peuvent être énergétiquement répartis dans la zone, interdite zone (niveau simple, bande uniforme ou queue exponentielle). La concentration des états peu profonds ou profonds peuvent être varier spatialement uniforme, pas à pas, linéaire ou exponentiel) [73].

II .3.2.2 Etats d'interface et discontinuités de bande

Les niveaux de quasi-fermi sont autorisés à être discontinus aux interfaces, pour les analyser Mathématiquement, un nœud supplémentaire à chaque interface est introduit dans la discrétisation, le SCAPS-1D utilise le modèle de Pauwells Vanhoutte et le modèle prend en compte quatre bandes pour les états d'interface, à savoir les bandes de conduction et de valence semi-conducteurs à l'interface. Cette théorie considère la recombinaison des électrons d'un semi-conducteur avec des trous d'un autre semi-conducteur avec la norme recombinaison d'électrons avec des trous dans le même semi-conducteur.

La charge totale dans les états d'interface est égale à la discontinuité du déplacement diélectrique à l'interface [74].

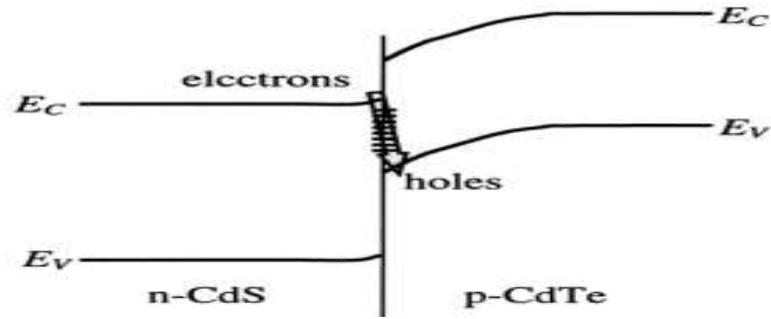


Figure II.4 : Modèle de Pauwells Vanhoutte pour la recombinaison d'interface.

Dans ce cas pertinent pour un CdS / CdTe, le chemin de recombinaison dominant est situé entre électrons et trous [75]. Dans SCAPS, les états d'interface peuvent être répartis en énergie de la même manière que la masse des états, aux interfaces métal-semi-conducteur (contacts), le transport des porteurs majoritaires est décrit par émission thermo-ionique (théorie de Bethe). Le courant d'émission thermique des électrons pour deux semi-conducteurs à bande interdite directe avec masses effectives identiques, est donnée par :

$$J_{thn} = V_{thn} (n^{(1)} \exp(-\frac{|\Delta E_c|}{KT}) - n^{(2)}) \quad (II.61)$$

Où

J_{thn} = courant de particules du semi-conducteur 1 à 2

n = vitesse thermique des électrons ;

$n^{(1)}, n^{(2)}$ = concentrations d'électrons ;

ΔE_c = discontinuité dans la bande de conduction,

Au contact métal semi-conducteur, les équations aux limites sont imposées à l'équation de la continuité pour les électrons :

$$J_n = S_n (n - n_{eq}) \quad (II.62)$$

Où, n_{eq} est le nombre d'électrons au contact à l'équilibre [76].

Présentation du SCAPS-1D

SCAPS (un simulateur de capacité de cellule solaire) est un programme de simulation numérique écrit et mis à jour à l'université de Gand (Burgelman et al. 2000). Il est conçu comme un dispositif général à couche mince poly cristallin.

Il est principalement utilisé pour la modélisation de cellules solaires à base de CdTe et CIGS / CIS. Jusqu'à sept couches peuvent être ajoutées à l'appareil et pour chaque couche ou contact, toutes les propriétés physiques et électroniques peuvent être affichées et modifiées dans une fenêtre séparée. Des modèles simples sont utilisés pour la dépendance de la densité d'états effective et de la vitesse thermique en fonction de la température, d'autres paramètres tels que

la bande interdite et les mobilités sont indépendants de la température. Pour chaque couche, il est possible de définir jusqu'à trois niveaux profonds et de placer trois états d'interface entre deux couches. Ces niveaux profonds peuvent être énergétiquement répartis dans la bande interdite (niveau unique, uniforme, gauss ou queue exponentielle).

Les niveaux massifs profonds peuvent également varier spatialement à l'intérieur de la couche)uniforme, pas à pas, linéaire ou exponentiel), toutes les autres propriétés peuvent être classées pour chaque couche du périphérique.

La recombinaison profonde et leur occupation sont décrites dans le formalisme de Shockley – Read – Hall (SRH), la recombinaison aux états d'interface est décrite par une extension du formalisme SRH)Pauwels et Vanhoutte, 1978), permettant l'échange d'électrons entre les états d'interface et les deux bandes de conduction adjacentes et de trous entre les états et les deux bandes de valence adjacentes, SCAPS possède le plus grand nombre de mesures électriques qui peuvent être simulées:

Les avantages de SCAPS-1D incluent les fonctionnalités suivantes [82]:

- Il a une interface utilisateur claire, et c'est une sorte de logiciel interactif. Presque tous les paramètres les paramètres peuvent être enregistrés en tant que fichiers de code ASCII externes et lus à partir de fichiers externes.
- Il permet aux utilisateurs d'écrire des langages de script et de les exécuter
- Dans l'aspect du paramétrage de l'appareil, presque tous les paramètres peuvent être classés

II.3.4. Méthode d'utilisation du SCAPS:

SCAPS-1D est un programme conçu pour fonctionner sous Windows. Pour simuler et contrôler toutes les paramètres par SCAPS-1D, trois grandes fenêtres (champs) sont nécessaires à accéder successivement:

- Fenêtre d'exécution (« action panel ») ;
- Fenêtre de conception de dispositif et la définition du problème (« Définition panel »)
- Fenêtre des résultats

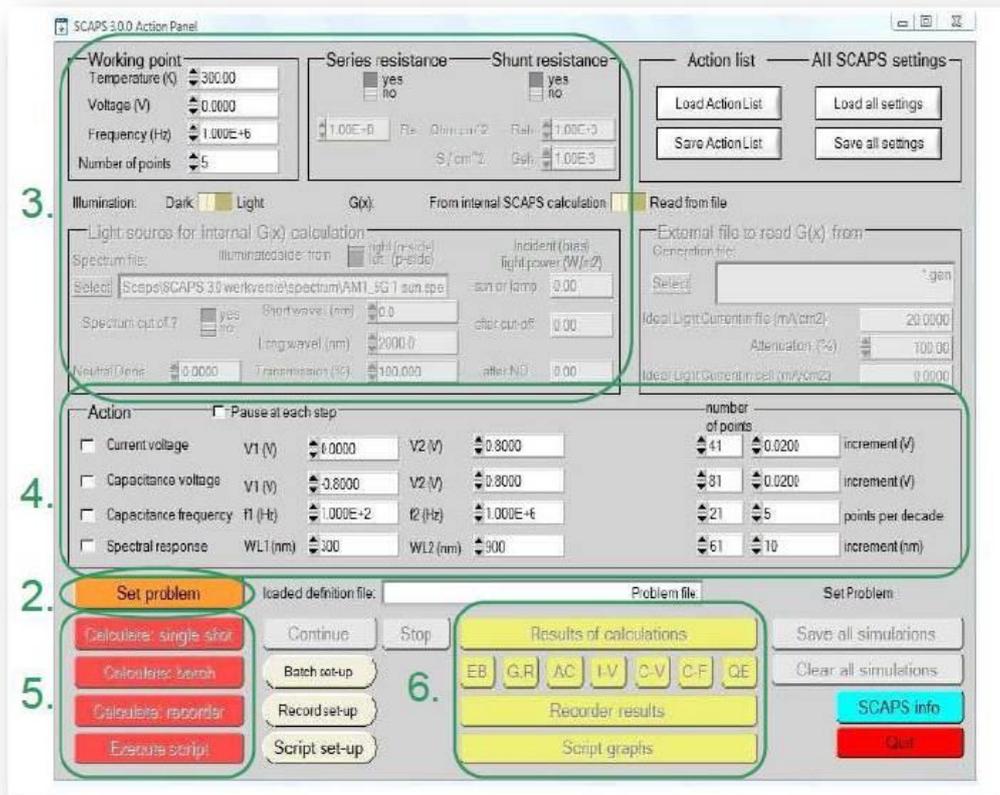


Figure II.5: Panneau de démarrage de SCAPS, le panneau d'action ou principal

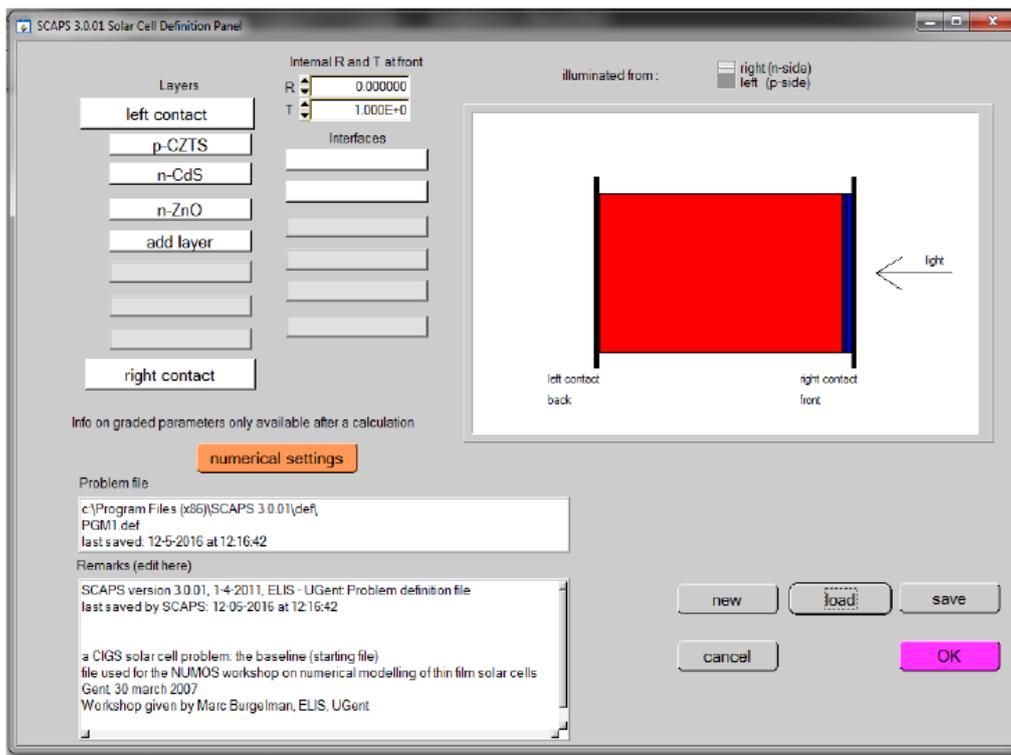


Figure II.6 : Présentation d'une structure sous SCAPS-1D

3. Accès aux points de fonctionnements :

Le point de fonctionnement est déterminé par la structure étudiées et des mesures nécessaires Ceci implique :

- **La température T** : Importante pour toutes les mesures. Par exemple $N_c(T)$, $N_v(T)$, les vitesses thermiques, le voltage thermique kT et tous leurs dérivés sont les seuls variables qui ont une dépendance thermique explicite.
Le voltage V : SCAPS commence toujours à V_0 , et s'exécute au voltage du point de fonctionnement par un nombre d'étapes qu'on doit aussi spécifier.
- **La fréquence f** : elle ne concerne pas les simulations I-V, $QE(\lambda)$ et C-f. C'est la fréquence dans laquelle la caractéristique C-V est simulée.
- **L'illumination** : elle est utilisée dans toutes les mesures. Les paramètres de base sont : l'obscurité ou la lumière, le choix du côté illuminé, le choix du spectre. Le spectre d'illumination on Sun ($= 1000 \text{ W/m}^2$).

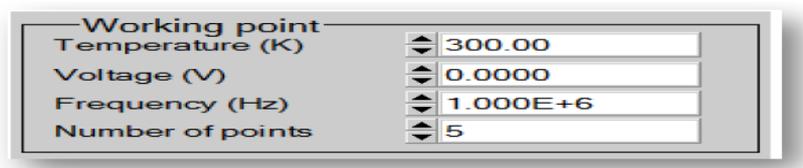


Figure II.7: Le point de fonctionnement.

4 .Sélection des caractéristiques à simuler :

Choix d'un ou plusieurs mesures à simuler: I- V, C-V, C-f et Q-E(λ).

5. Résultats de simulations :

Après simulations, l'affichage des résultats sous forme de tableau est simple « show data »figure (I.8).



Figure II.8 : Panneau des bandes d'énergie

Les courbes I-V :

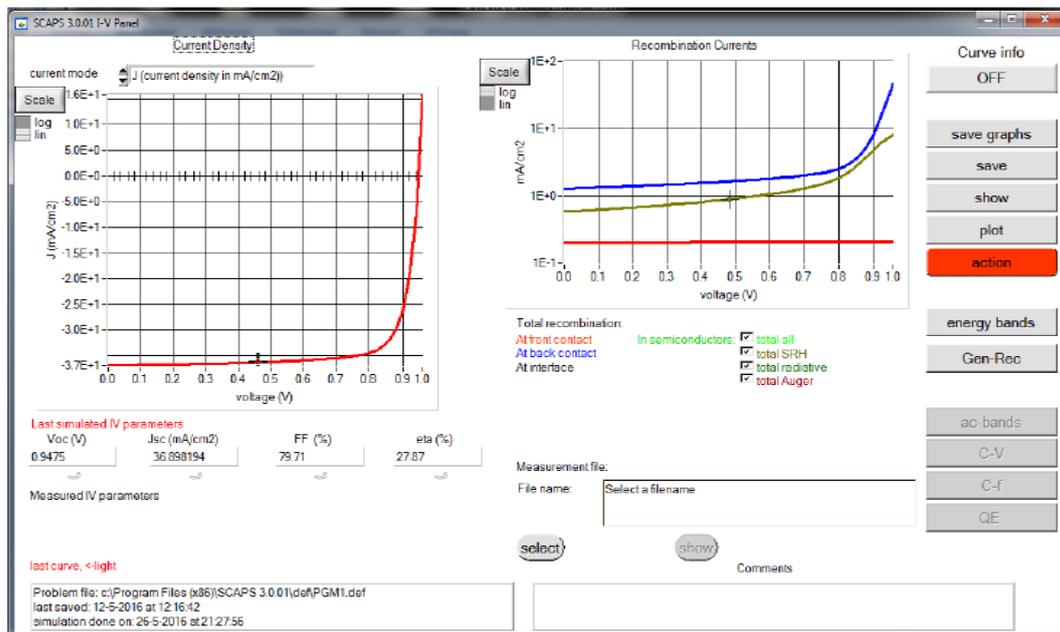


Figure II.9 : Panneau d'affichage des courbes I-V à l'obscurité et en éclaircissement.

6. Edition de la structure d'une cellule solaire:

L'icône 'SET PROBLEM' sur le panneau d'action puis accès au panneau 'SOLAR CELL DEFINITION' l'édition générale de la structure est possible, *Figure II.10*.

Les propriétés des couches, des contacts et d'interfaces peuvent être modifiées par 'ADD LAYER'

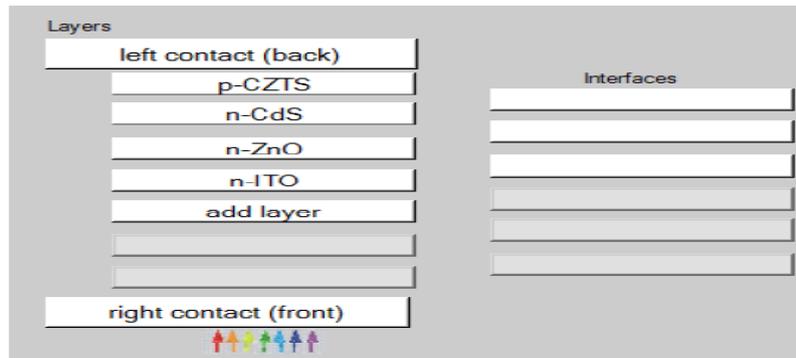


Figure II.10 :Définition de la structure d'une cellule solaire.

10. Propriétés de Contacts :

Un panneau des propriétés de contact 'CONTACT PROPERTIES PANEL' est disponibleFigure II.11.

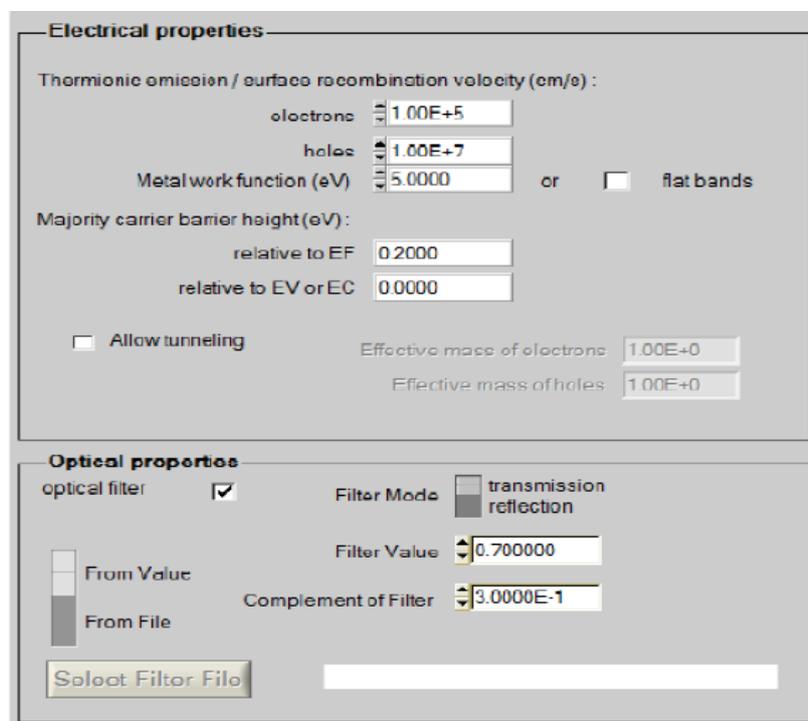


Figure II.11: Panneau des propriétés des contacts

11. Choix et introduction des couches :

Les figures ci-dessus facilitent la tâche à l'utilisateur de choisir les couches convenable pour concevoir la cellule solaire à simuler

SCAPS 3.2.01 Layer Properties Panel

LAYER 1 p-CZTS

thickness (μm)	2.000
	uniform pure A (y=0)
The layer is pure A: y = 0, uniform	0.000
Semiconductor Property P of the pure material	pure A (y = 0)
bandgap (eV)	1.500
electron affinity (eV)	4.500
dielectric permittivity (relative)	10.000
CB effective density of states ($1/\text{cm}^3$)	2.200E+18
VB effective density of states ($1/\text{cm}^3$)	1.800E+19
electron thermal velocity (cm/s)	1.000E+7
hole thermal velocity (cm/s)	1.000E+7
electron mobility (cm^2/Vs)	1.000E+2
hole mobility (cm^2/Vs)	2.000E+1
<input type="checkbox"/> Allow Tunneling	effective mass of electrons 1.000E+0
	effective mass of holes 1.000E+0
no ND grading (uniform)	
shallow uniform donor density ND ($1/\text{cm}^3$)	0.000E+0
no NA grading (uniform)	
shallow uniform acceptor density NA ($1/\text{cm}^3$)	1.000 16

Figure II.12 : Propriétés de la couche ajouté

no ND grading (uniform)	
shallow uniform donor density ND ($1/\text{cm}^3$)	1.0 0.00E+0
no NA grading (uniform)	
shallow uniform acceptor density NA ($1/\text{cm}^3$)	0 1.00+16

Figure II.13: Propriétés des dopages définis.

Absorption model Show / Set alpha(composition: lambda)

	alpha (y=0)	alpha (y=1)
	<input checked="" type="checkbox"/> from model	<input checked="" type="checkbox"/> from model
	<input type="checkbox"/> from file	<input type="checkbox"/> from file
absorption constant A ($1/\text{cm eV}^{1/2}$)	1.000E+5	1.000E+4
absorption constant B ($\text{eV}^{1/2}/\text{cm}$)	0.000E+0	0.000E+0
	sorption\CuInSe2.abs	
	absorption file for y = 0	absorption file for y = 1

show save

Figure II.14: Modèle de l'absorption

Conclusion

Au terme de ce chapitre, nous pouvons choisir le logiciel SCAPS pour la simulation dans ce présent travail de thèse pour ses plusieurs caractéristiques importantes et indispensables comme: la possibilité de la réalisation des cellules avec des couches minces permettant d'obtenir quatre propriétés de la cellule : le courant I_{cc} , le voltage V_{co} , le FF et le rendement .

D'autres propriétés comme les courbe (I.V) et (QE), Ainsi qu'une interface facile à utiliser, permettent de contrôler plusieurs facteurs et conditions du fonctionnement de la cellule à savoir : la température, l'intensité de l'illumination, et la concentration de dopage.

Le choix de code Vien2K et du SCAPS 1D dans ce travail de recherche était nécessaire pour en profiter de leurs diverses propriétés d'approximation et avantages citées ci-dessus .

Chapitre 3

Cellules à base 3C-SiC, Etude et Applications

Introduction :

Dans ce travail, il est important de s'intéresser au carbure de silicium (un semi-conducteur binaire de groupe IV-IV) pour arriver aux résultats souhaités. Le carbone possède plusieurs structures, c'est un matériau poly types alors que le carbure de silicium SiC est un semi-conducteur à large bande interdite, il a de nombreuses applications en microélectronique et en optoélectronique. On s'intéresse aux structures poly-types hexagonales du SiC: 2H et 4H et au cubique 3C-SiC, les propriétés structurales, électroniques sont calculées avec la fonction de densité (DFT) avec ses approximations de remorquage (GGA) et Mbj.

Les premières structures photovoltaïques sont explorées, celui étant à base de silicium qui est homo-jonction P-N et P-I-N est un type de cellules solaires qui remonte aux travaux menés par Ohl[83] en 1941 dans lesquels il montrait un dispositif photovoltaïque à jonction PN, environ 12 ans plus tard il deviendrait un dispositif de jonction Si PN monocristallin avec un rendement de 6% [84].

En 1958, la technologie des jonctions et les dispositifs à base des jonctions sont diffusés avec un rendement de 14%, alors que les cellules Si ont continué à se développer, des efforts ont été déployés sur les cellules d'homo-jonction PN basées sur d'autres matériaux semi-conducteurs monocristallins, binaire et ternaire.

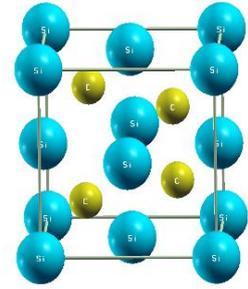
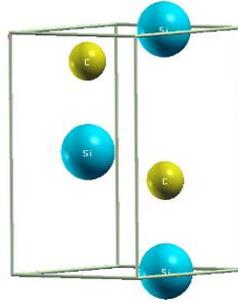
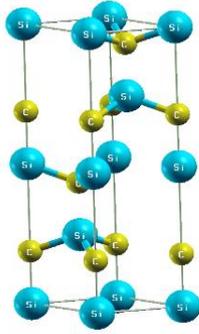
III.1. L'étude des Propriétés structurale et électronique de 3C-SiC , 2H-SiC et 4H-SiC

III.1.1 Optimisation et propriétés structurales

L'objectif de cette partie est de calculer les propriétés structurales et électroniques du carbure de silicium dans trois structures: cubique 3C-SiC et deux autres hexagonales 2H-SiC et 4H-SiC, pour cela, la méthode DFT est implémentée dans le code wien2k avec deux approximations : GGA et MBJ qui sont présentées dans le chapitre précédent.

Après une optimisation et fixation des paramètres de calcul comme le nombre de points K, le produit $R_{mt} * K_{max}$ et le G_{max} . Les propriétés structurales sont déterminées à partir des résultats expérimentaux extraites des publications de la littérature, la figure III-présente ces structures par le code wien2k.

La simulation donne l'énergie en fonction du volume qui aide à l'optimisation structurale des trois structures de carbure de silicium: cubique "3C-SiC, 2H-SiC et 4H-SiC, le tableau III-1 exprime les résultats des propriétés structurales obtenus..



C- Structure hexagonale (4H-SiC)de carbure de silicium

B- Structure hexagonale (2H-SiC)de carbure de silicium

A- Structure cubique (3C-SiC)de carbure de silicium

Figure III-1: Structures de carbure de silicium de cubique (3C-SiC) et hexagonal (2H-SiC et 4H-SiC) dans le code wien2k

Tableau III.1 Résultats des propriétés structurales des structures: 3C-SiC,2H-SiC et 4H-SiC de carbure de silicium

Carbure de silicium	V	B (GPa)	B'	a (Å ⁰)	c(Å ⁰)
3C-SiC (notre calcul) (autre calcul) (experimental)	141.9933	210.5866	4.3347	4.3824 4.3596 ^[86]	
2H-SiC (notre calcul) (autre calcul) (experimental)	284.2244	212.4942	3.8921	3.0937 3.076 ^[85] ,3.0777 ^[86] 3.08 ^[87]	5.0810 5.048 ^[85] , 5.0486 ^[86] 5.05 ^[87]
4H-SiC (notre calcul) (autre calcul) (experimental)	568.1889	212.3169	3.8540	3.0961 3.081 ^[85] ,3.0799 ^[86] 3.08 ^[88]	10.141 10.084 ^[85] ,10.081 ^[86] 10.08 ^[88]

Le SiC est le seul composé IV-IV à former des structures ordonnées stables et à long terme (poly-types). Plus de 100 poly-types différents ont été observés [89].

Le carbure de silicium SiC cubique avec une structure de mélange de Blende de zinc (cubique) est appelée 3C-SiC où sa structure cristalline avec un groupe spatial de (T_d² - F43m) et les deux structures hexagonales : 2H-SiC et 4H-SiC avec groupe spatial de (C_{6v}⁴ -P63mc) et (C_{6v}⁴ -P63mc) respectivement sont illustrée à la Figure III-1.

Les paramètres du réseau d'équilibre sont donnés comme suit :

$a=b=c= 4.3824 \text{ (Å}^0\text{)}$ et $\alpha = \beta= \gamma= 90^\circ$ pour la structure 3C-SiC,

$a= 3.0937, c=5.0810 \text{ (Å}^0\text{)}$ pour la structure 2H-SiC

$a= 3.0961, c=10.141 \text{ (Å}^0\text{)}$ pour la structure 4H-SiC

Ces derniers sont comparés avec des mesures expérimentales et des autres calculs dans le tableau III-1 où un accord satisfaisant doit être trouvé entre les valeurs calculées (simulation) d'un côté et les valeurs mesurées expérimentalement [87-88] d'un autre côté.

III .1.2 Les propriétés électroniques :

Les structures des bandes d'énergie du SiC dans la structure de zinc (3C-) et les structures de wurzite (2H-SiC) ont été calculées de manière théorique par différents auteurs (voir le premier rapport de Kobayashi en 1956[89]).

Le carbure de silicium avec ses différentes structures ont les deux types de la bande interdite; directe et indirecte, cette option donne une variation d'applications de ces matériaux dans tous les domaines technologiques notamment les dispositifs électroniques.

Dans le code Wien2K et à l'aide de deux approximations GGA et Mbj intégrés dans ce dernier permet, la structure de bande du carbure de silicium cubique 3C-SiC et les deux structures hexagonales 2H-SiC et 4H-SiC sont illustrées la Figure III-2; dont tous les poly-types SiC sont des semi-conducteurs indirects et le maximum des bandes de valence supérieures est situé au centre (point gamma Γ) de la zone de Brillouin (BZ).

La structure de la bande contient deux parties: Les bandes de valence et de conduction avec une bande indirecte, comme c'est illustré dans la Figure III-2.

Tableau III-2 Les propriétés électroniques du carbure de silicium dans la structure cubique 3C-SiC et dans l'hexagonal: 2H-SiC et 4H-SiC.

Les méthodes de nos calculs	3C-SiC	2H-SiC	4H-SiC
(GGA)			
E_g (eV) (indirect)	1.355 (Γ -X)	2.335 (Γ -K)	2.260 (Γ -M)
E_g (eV) (direct)	6.008 (Γ - Γ)	4.6857(Γ - Γ)	4.917(Γ - Γ)
E_g (eV) (des autres calculs)	2.38	3.33	3.26
(MBJ)			
E_g (eV) (indirect)	2.3821 (Γ -X)	3.344 (Γ -K)	3.200 (Γ -K)
E_g (eV) (direct)	6.970 (Γ - Γ)	5.601 (Γ - Γ)	5.931 (Γ - Γ)
E_g (eV) (des autres calculs)			
Experimental	2.417 2.42, 2.39 ^a	3.33 ^a	3.27 ^a 3.28, 3.26 ^a

a: V.N. Brudnyi a, A.V. Kosobutsky Superlattices and Microstructures xxx (2017) 1-7

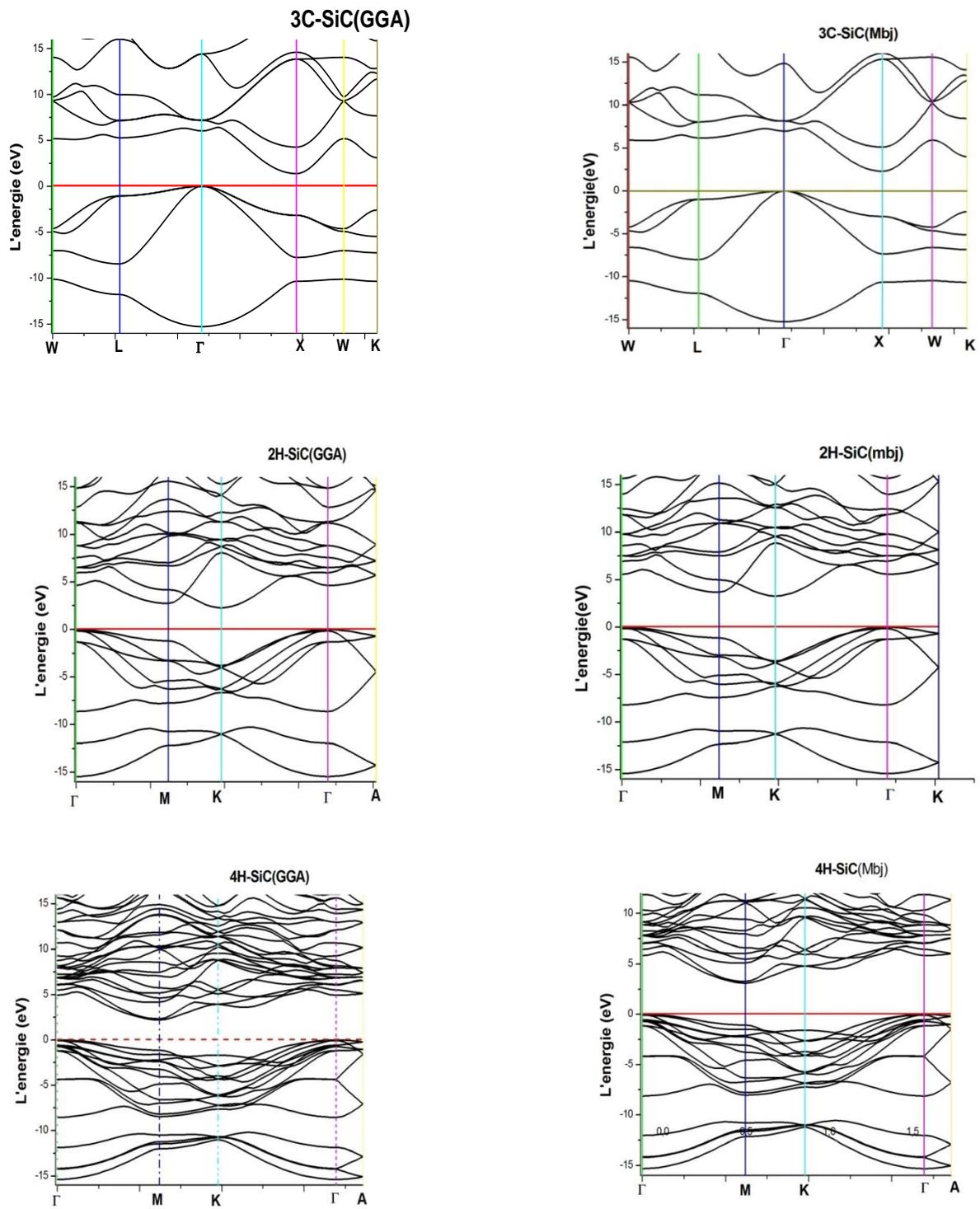


Figure III-2: Les structures des bandes de carbure de silicium: (cubique 3C-SiC et hexagonal 2H-SiC et 4H(SiC) calculé avec les deux approximations GGA et Mbj avec le code Wien2k.

Les valeurs d'énergie de gap calculé avec les deux approximations GGA et mBJ sont illustrées dans le tableau III-2. Ils sont bien confirmés avec les résultats mesurés expérimentalement et aussi avec des autres calculs théorique.

Les valeurs calculées par les deux approximations GGA et Mbj intégrées dans le code Wien2K de l'énergie de gap de la structure cubique de carbure de silicium 3C-SiC sont présentées dans le tableau III-2, ainsi que celles obtenues à partir de mesures optiques [106,107].

Tous les résultats indiquent que la bande interdite indirecte minimale de 2,417 eV est attribuée à X- Γ expérimentalement et 2.3821 eV aussi à (Γ -X) par notre calcul simulé avec l'approximation mbj.

L'autre structure cristalline simple parmi les poly-types SiC est 2H-SiC, connue par sa plus grande bande interdite, il y a quatre atomes par cellule unitaire de structure hexagonale compacte, c'est-à-dire hexagonalité h est à l'unité.

Les valeurs calculées des principales énergies de gap rapporté (à l'aide de code Wien2k) sont présentées dans le tableau III-2, ainsi que celles obtenues à partir de mesures expérimentales. La valeur de cet espace indirect Γ -K dans le cas du calcul de la GGA a été ajustée à 3.344 eV avec Mbj.

Comme mentionné dans l'introduction, les structures de bande des poly-types autres que 3C-SiC et 2H-SiC sont mal connues, ce qui résulte du nombre relativement grand d'atomes par cellule élémentaire primitive de ces poly-types, ce qui complique énormément le calcul. Junginger et Haeringen [100] ont calculé les structures de bande de 4H-SiC et 6H-SiC ainsi que de 3C-SiC et 2H en utilisant EPM. Cependant, ils n'ont obtenu les niveaux d'énergie que pour certains points de symétrie, c'est-à-dire les points Γ , K, H, M et L. Pour le 4H-SiC, il a été trouvé un gap Γ -M indirect de 2,8 eV, à comparer au gap énergétique obtenu de manière expérimentale de 3,26 eV.

D'après les calculs théoriques établis avec le code Wien2k, les deux poly-types 3C-SiC et le 2H-SiC ont le maximum de la bande de valence au centre de la zone (point Γ). Cependant, l'emplacement du minimum de la bande de conduction dans l'espace k dépend du poly-type.

Les deux poly-types étudiés jusqu'à présent ont des bandes interdites indirectes, qui augmentent de façon monotone avec l'hexagonalité des poly-types h , de $E_g=2.3821$ (Γ -X) pour 3C-SiC ($h = 0$) à $E_g= 3.344$ (Γ -K) pour 2H-SiC ($h = 1$) -ces résultats sont calculé avec

l'approximation mbj- comme nous avons présenté nos résultats comparés avec des autres calculs théorique et mesures expérimentaux.

Comme mentionné précédemment, les structures de bande des autres poly-types que 3C-SiC et 2H-SiC sont mal connues, ce qui résulte du nombre relativement grand d'atomes par cellule élémentaire primitive de ces poly-types, ce qui complique énormément le calcul. Junginger et Haeringer [100] ont calculé les structures de bande de 4H-SiC et 6H-SiC ainsi que de SiC 3C et 2H-SiC en utilisant EPM. Cependant, ils n'ont obtenu les niveaux d'énergie que pour certains points de symétrie, c'est-à-dire les points Γ , K, H, M et L. Pour le 4H-SiC, un gap Γ -M indirect de 2,8 eV a été trouvé, à comparer avec l'écart d'énergie de 3,26 eV obtenu expérimentalement.

Nos valeurs calculées dans ce travail par le code Wien2k des gaps d'énergie rapportés sont présentées dans les tableaux III-2 ainsi que celles obtenues à partir des autres calculs et mesures expérimental [106], ces valeurs correspondent bien à la valeur obtenue par Gavrilenko et ses collaborateurs [107]. Selon leurs calculs, les intervalles optiques directs dans le 4H-SiC avec une énergie inférieure à 6 eV ne se produisent que près du point M dans l'espace k.

Tous les poly-types SiC ont le maximum de la bande de valence au centre de la zone mais le minimum de la bande de conduction dépend du poly-type. Les bandes interdites indirectes augmentent avec l'hexagonalité de poly-type de 2.3821 eV à (Γ -X) eV pour 3C-SiC à 3.344 eV à (Γ -K) pour 2H-SiC. Dans le 3C-SiC, silicium et carbone isolés des lacunes et un complexe de divorces de carbone et de silicium produisent des états dans l'intervalle interdit, mais pas les défauts anti-sites.

Nos valeurs de gap d'énergie dans 3C-SiC, 2H-SiC et 4H-SiC qui sont calculés théoriquement par la simulation avec le code Wien2k surtout avec l'approximation Mbj correspondent bien aux valeurs expérimentales. Avec un décalage de 1 eV de l'énergie de gap qui est calculé avec l'approximation GGA pour les trois structures: 3C-SiC, le 2H-SiC et 4H-SiC.

De nombreuses applications électroniques et optoélectroniques basées sur les propriétés électroniques et optiques de base du SiC ont été proposées. Il existe cinq applications principales de

Matériaux à base de SiC:

1. microstructures,
2. dispositifs optoélectroniques,

3. électronique à haute température,
4. électronique à rayonnement et
5. dispositifs à haute puissance / haute fréquence.

Les applications de microstructure comprennent les masques à rayons X et les structures micro-usinées telles que les diaphragmes de haut-parleurs et des outils spéciaux de micro-application. Les applications optoélectroniques incluraient des substrats pour la famille des dispositifs à base de nitrure, des diodes électroluminescentes et des détecteurs UV. En raison des SiC, une large bande interdite presque tous les dispositifs fabriqués sur SiC peuvent être considérés pour des applications à haute température [109]. De nombreux chercheurs travaillent pour retrouver une alternative du CdS (2,4 eV) c'est-à-dire un matériau qui a une large bande interdite.

III .2. Simulation numérique de cellule solaire avec le SCAPS-1D

En outre, notre étude a ciblé les cellules à base 3C-SiC dans deux modèles : homo-jonction PN, PIN. Notre calcul est tout d'abord basé sur le test de l'application photovoltaïque de carbure de silicium avec deux types des jonctions PN et PIN, à l'aide de SCAPS qui nous permet de savoir l'effet de quelques paramètres physiques comme les pertes optiques et les pertes résistives, température, recombinaison et l'intensité d'illumination...) sur les caractéristiques de la cellule solaire : I, V, FF et η .

On peut obtenir les caractéristiques principales de cellule solaire à travers les valeurs des propriétés électroniques entrant pour le matériau étudié qui sont classés dans le tableau III-1. Ce logiciel de simulation SCAPS permet d'analyser l'effet des paramètres géométriques et les conditions physiques de fonctionnement de cellule, avec des facteurs technologiques limitant le rendement comme les résistances séries et shunt (Pertes résistives), la température et l'intensité, ...).

III .2.1 Etude de l'effet photovoltaïque d'homo-jonction PN à base de 3C-SiC simulé par SCAPS-1D:

On a simulé une jonction PN à base de 3C-SiC (carbure de silicium dans la phase cubique) où la figure I-1 présente cette structure, les paramètres entrant qui sont montrés dans le tableau III-1 [110] sont utilisés. Dans deux cas (in dark et light) le tableau III-2 présente la possibilité de réaliser une cellule solaire avec une homo jonction PN à base de 3C-SiC,

ainsi grâce à ces propriétés physiques surtout la dureté de ce matériau il a aussi une possibilité d'être une base d'une cellule solaire.



Figure III-3 la structure de la jonction PN à base de 3C-SiC.

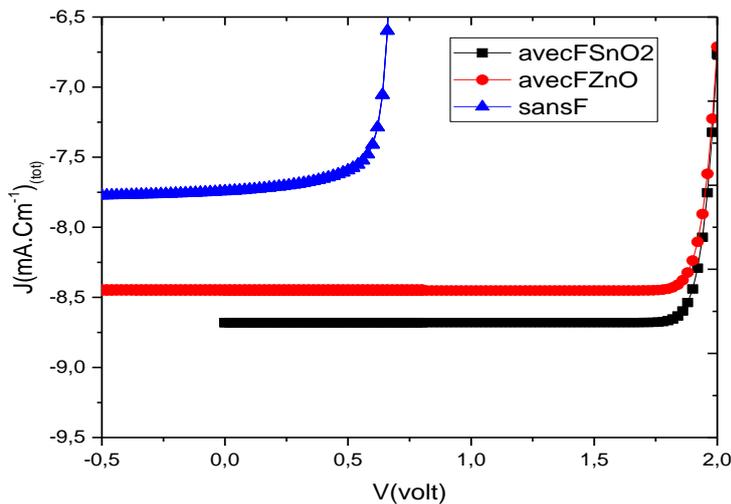
Pour diminuer les pertes d'énergie des photons incidents on a utilisé deux types des matériaux TCO (ZnO et SnO₂) . Selon les courbes de I(V) de la jonction PN sans et avec couches antireflet (ZnO et SnO₂)Figure III-2, la couche antireflet joue un rôle très important pour augmenter le rendement d'une jonction à base de 3C-SiC.

Tableau III-3 les paramètres entrants [110].

	p-SiC	n-SiC	n-ZnO	n-SnO ₂
Thickniss (μm)	2.2	0.5	0.02	0.02
Eg(eV)	2.36	2.36	3.3	3.6
Electron affinity(eV)	3.8	3.8	4.6	4.5
Dielectric constant	9.72	9.72	9.00	9.00
Nc(cm⁻³)	4.82*10 ¹⁵	4.82*10 ¹⁵	2.2*10 ¹⁸	2.2*10 ¹⁸
Nv(cm⁻³)	3.2*10 ¹⁵	3.2*10 ¹⁵	1.8*10 ¹⁹	1.8*10 ¹⁹
μ_e(cm²/v_s)	900	900	100	100
μ_{hole}(cm²/v_s)	40	40	25	25
N_D(cm⁻³)	00	10 ¹⁸	10 ²⁰	10 ²⁰
N_A(cm⁻³)	10 ²⁰	00	00	00
Ve(cm/s)	1*10 ⁷	1*10 ⁷	1*10 ⁷	1*10 ⁷
Vhole(cm/s)	1*10 ⁷	1*10 ⁷	1*10 ⁷	1*10 ⁷

Tableau III-4 les caractéristiques électriques obtenus pour une homo-jonction à base de 3C-SiC [111].

	$V_{co}(v)$	$J_{co}(mA/cm^2)$	FF%	$\eta\%$
(n-SiC/p-SiC)	0.7198	7.841054	81.35	4.59
(n-ZnO/n-SiC/p-SiC/)	4.6101	7.834511	42.51	15.35
(n-SnO2/n-SiC/p-SiC)	4.6127	7.882370	42.49	15.45



La figure III-4 Caractéristique I-V de homo-jonction PN à base de 3C-SiC[111].

L'amélioration du rendement de conversion d'une cellule photovoltaïque est liée avec plusieurs facteurs. La décroissance des pertes d'énergie des photons incidents : la figure III-2 présente le courant I en fonction de la tension V détermine l'existence de la couche antireflet de type TCO pour réduire la perte d'énergie des photon incidents à un degré significatif où le rendement de l'homo-jonction PN à base de 3C-SiC est élevé de 5% vers (15% et 16%), selon le type de matériau TCO de la couche antireflet.

III.2.2 Choix de type de matériau de la couche antireflet pour une cellule solaire à base de 3C-SiC.

A partir de la simulation précédente, le carbure de silicium 3C-SiC plus de ces propriétés physiques variés a un effet photovoltaïque important avec la couche antireflet, cette dernière est un facteur influant pour l'amélioration du rendement de la cellule solaire, Les TCO sont ciblés par de nombreux chercheurs à cause de leur large gamme d'applications.

Dans cette partie , le travail a pour objectif d'étudier les effets des TCOs utilisés comme couche antireflet sur les propriétés de la cellule solaire à homo-jonction, à base de 3C-SiC où une simulation de la jonction PN au carbure de silicium dans la phase cubique 3C-SiC avec une couche de SnO₂ puis avec ZnO comme couche antireflet est réalisée.

La variation des propriétés des TCO à savoir le dopage, le coefficient de réflexion, l'épaisseur de la couche joue un rôle très important sur le rendement de la cellule.

La simulation de la jonction PN à base de 3C-SiC avec deux types des couches antireflet le première avec le ZnO puis avec le SnO₂, la caractérisation courant-tension et le rendement quantique sont présentés dans les courbes de la figure III-2 et figure III-succesivement ainsi que les caractéristiques électriques de ces structures sont montrées dans le tableau III-2.

La simulation a donné le choix du bon matériau SnO₂ de la couche antireflet avec le matériau carbure de silicium dans la phase cubique 3C-SiC avec un rendement importante plus de 15%.

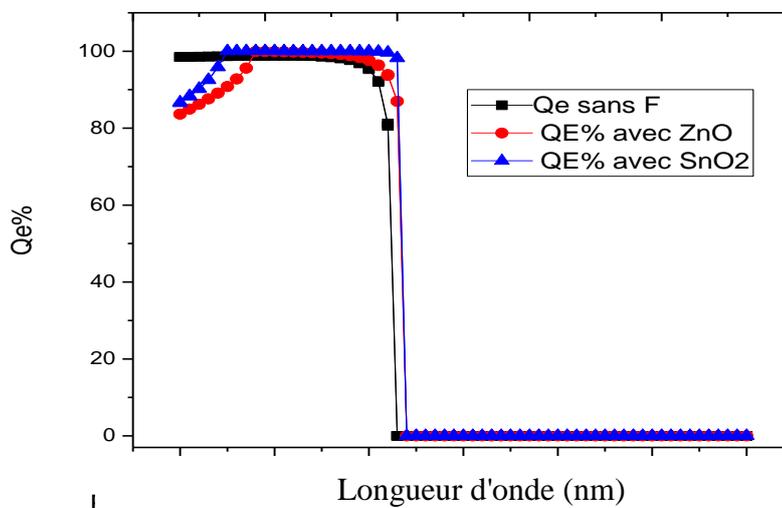


figure III-5 le rendement quantique de la cellule solaire à base de 3C-SiC(PN homo-jonction)

Le carbure de silicium avec toutes ses structures est classé parmi les semi-conducteurs qui possèdent un large gap (au minimum supérieur de 3.3 eV correspondant à une longueur d'onde de 400 nm)[112]et qui sont théoriquement transparents dans le domaine du visible.

Dans un autre volet, on trouve d'autres facteurs qui ont un effet sur les caractéristiques électriques de la cellule solaire, qui seront discutés dans la suite de cette partie à travers l'étude de l'impact des quelques facteurs technologiques sur le rendement de la cellule solaire à base de 3C-SiC, notamment les pertes optiques, les pertes résistives, L'effet de la température et les pertes par recombinaison.

III.2.3 Les facteurs technologiques limitant le rendement

D'autres mécanismes limitent encore le rendement de conversion des cellules. Ces limitations sont majoritairement technologiques et peuvent éventuellement être diminuées en améliorant les procédés de fabrication. Elles sont de trois formes : optiques, résistives et recombinaison des porteurs de charge [113].

III.2.3.1. Pertes optiques

L'absorption incomplète des photons incidents est à l'origine des pertes optiques se traduisant par une réduction de la génération de paires électron-trou et donc du courant de court-circuit I_{cc} de la cellule solaire. Selon leur origine il existe trois types de pertes optiques[113] :

Par réflexion:

Une partie du flux lumineux incident est t perdue par réflexion à la surface du substrat qui a un indice de réfraction élevé. La texturation et le dépôt d'une couche antireflet permettent d'abaisser la réflectivité effective (intégrée sur le spectre solaire) de 40% à 5%.

Par faible rendement d'absorption:

A cause de l'épaisseur limitée de la cellule, une part non négligeable de photons dans le proche infrarouge, ayant néanmoins l'énergie requise, traverse l'épaisseur de la structure sans être absorbés. Des techniques de piégeage par réflexion sur la face arrière peuvent augmenter de manière significative l'absorption, particulièrement dans le cas des cellules minces.

Par ombrage:

Les contacts métalliques réfléchissants à la surface de l'émetteur entraînent une zone d'ombrage pour le rayonnement incident. La grille métallique empêchant les photons de pénétrer dans le matériau recouvre environ 7% de la surface du substrat et contribue à la réduction du courant I_{cc} .

III.2.3.2. Pertes résistives

Les pertes résistives résultent de l'effet des résistances série R_s et parallèle R_p sur le rendement de la cellule solaire.

La résistance série R_s caractérise les pertes par effet Joule de la résistance propre du semi-conducteur et les pertes à travers les grilles de collecte et les mauvais contacts ohmiques de la cellule. Les contacts du semi-conducteur avec l'électrode à résistance élevée

abaissent appréciablement la tension et le courant de sortie, ce qui limite le rendement de conversion.

La résistance parallèle R_p (ou shunt) provient généralement de défauts de fabrication (ouverture de jonction incomplète, diffusion de métal à travers des émetteurs favorisés par des fissures...) qui introduisent des chemins de fuite pour le courant photo-généré et affectent à la fois le courant de court-circuit et la tension de circuit-ouvert. Le transport du courant dans la cellule solaire est également affecté par des effets résistifs des différents éléments constituant la cellule: les résistances série des lignes de sérigraphie et des « busbars » en face avant, la résistance série de la métallisation face arrière, les résistances de contact métal/semi-conducteur avant et arrière, les résistances propres de la base et de l'émetteur.

III.2.3.3. Pertes par recombinaison de paires électron-trou

Une fois la paire électron-trou créée, les charges doivent se diffuser jusqu'aux contacts de part et d'autre de la cellule. Cependant, si elles se recombinent avant d'atteindre les contacts, elles ne participeront plus à la génération de courant. Différents mécanismes peuvent entraîner la recombinaison de la paire électron-trou en volume ou en surface [114]. Les pertes par recombinaisons Auger sont intrinsèques au matériau tandis que les recombinaisons dites de Shockley-Read-Hall (SRH) sont liées aux défauts présents en volume et aux surfaces du substrat. Les recombinaisons affectent la tension de circuit ouvert V_{CO} via le courant de saturation I_{01} , ainsi que le courant I_{CC} lorsque les porteurs de charges se recombinent avant d'avoir atteint la ZCE. Les recombinaisons, lorsqu'elles auront lieu dans la ZCE, leurs effet sur le courant de saturation I_{02} est immédiat. Ces deux paramètres (I_{CC} et V_{CO}) ont un effet direct sur le rendement [113].

L'impact des quelques facteurs sur le rendement des cellules homo-jonction à base de 3C-SiC tel-que: les pertes optique et le choix le bon matériau pour le rôle d'une couche antirefletforment une partie essentielle et importante dans ce travail de these.

III.2.4. Effets internes et externes sur une cellule solaire de type PN à base de 3C-SiC

III .2.4.1. Effet de la température

D'autres paramètres ont un effet sur les caractéristiques électriques des cellules solaires tel que la température et les deux résistances Séries et Shunt.

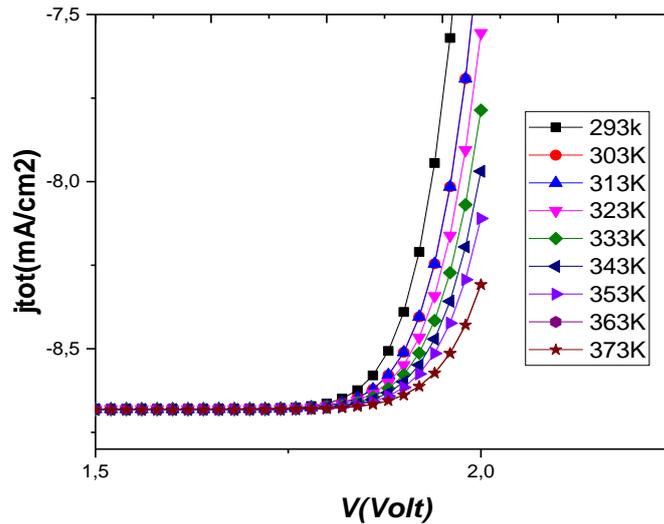


Figure III-6: l'effet de la variation de la température sur la caractéristique I-V d'une cellule solaire à base de 3C-SiC.

Dans certaines conditions météorologiques, les cellules solaires servent mieux, cependant, vu que les circonstances changent continûment et les spécialistes installent les panneaux solaires partout dans le monde sous différentes régions climatiques, la majorité des panneaux ne fonctionnent pas dans des conditions optimales.

Les cellules solaires sont généralement exposées à des températures comprises entre 15 ° C (288 K) et 50 ° C (323 K) et la majorité des modélisations de semi-conducteurs sont réalisées à 300 K.

Dans notre cas, les cellules solaires homo-jonction à base de 3C-SiC sont simulées à une température inférieure et proche de 20 °C (373° K).

Les cellules solaires sont sensibles à la température comme tous les autres dispositifs à semi-conducteurs, en effet l'augmentation de la température peut être considérée comme une augmentation de l'énergie matérielle des électrons, une énergie faible de plus suffira pour rompre le lien.

Dans une cellule solaire, le paramètre le plus affecté par une augmentation de la température est la tension du circuit ouvert V_o , l'impact de l'augmentation de la température est illustré dans la figure III-4 ci-dessous. Les performances de la cellule solaire sont déterminées par ses paramètres, à savoir la densité de courant de court-circuit, la tension en circuit ouvert, le facteur de remplissage et le rendement. La tension du circuit ouvert diminue avec la température en raison de la dépendance de la densité de courant de saturation inverse (I_0) en fonction de la température tableau III-3. I_0 est un paramètre de diode important, car il

contrôle la modification des paramètres de performance en fonction de la température. L'équation pour I_0 d'un côté d'une jonction P-N est donnée par [114] ,

$$I_0 = qA \frac{Dn_i^2}{LN_D} \quad (\text{III-1})$$

Tableau III-5: Effet de la température sur les caractéristiques électriques de la cellule solaire

T (K°)	293	313	323	333	343	353	373
V _{co} = Volt	2.203757	2.337467	2.430903	2.550411	2.704848	2.888379	3.379506
J _{sc} = mA/cm ²	8.67968846	8.68037373	8.68085597	8.68120207	8.68162462	8.68185241	8.68238798
FF %	83.6065	79.6958	77.0471	73.8342	69.9886	65.8894	56.9001
η %	15.9922	16.1703	16.2587	16.3474	16.4351	16.5227	16.6957

III.2.4.2. Effet des résistances série et shunt

Pour concevoir un modèle général qui caractérise le comportement d'une cellule solaire sous différentes conditions, l'insertion d'une résistance série R_s et une résistance parallèle R_{sh} est nécessaire [115].

- La résistance série, R_s est composée de la résistance à la compression des matériaux semi-conducteurs et celle des contacts avant et arrière.
- La résistance de Shunt, R_{sh} illustre des fuites de courant à la jonction P-N autour de bordure de la cellule.

La cellule est idéale avec une résistance Shunt élevée ($R_{sh} = \infty$) et une résistance série faible ($R_s = 0$).

En effet, les R_s les plus modernes influencent essentiellement la région de tension située au-dessus de V_{mp} , cependant la tension du circuit ouvert n'est pas influencée par la R_s .

Par ailleurs, l'influence de R_{sh} est évidente au niveau de la plage de base tension (tension tend vers zéro), les R_s et la R_{sh} pourraient respectivement réduire J_{sc} et V_{co} [116].

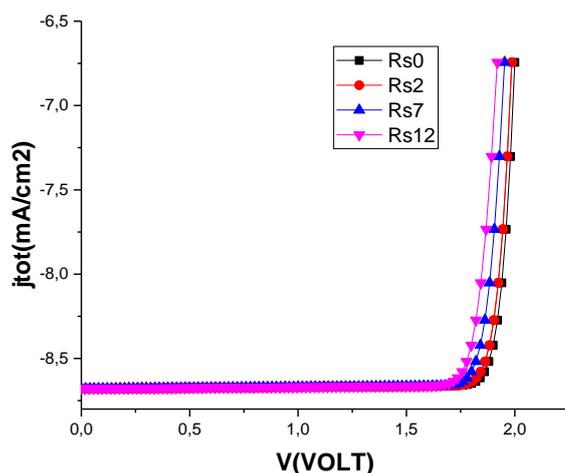


Figure III-7: Effet de la résistance série sur la caractéristique I-V d'une cellule solaire à base de 3C-SiC.

A travers la simulation d'une homo-jonction de cellules solaires de type PN à base de 3C-SiC, l'étude de deux facteurs importants pour ces dispositifs électroniques, notamment la température et des paramètres de pertes liés aux résistances R_s et R_{sh} sont nécessaires pour un choix judicieux de matériau TCO entre le ZnO largement utilisé comme une couche antireflet et le SnO_2 .

Les résultats de simulation numérique avec SCAPS montrent que le matériau SnO_2 peut réduire les pertes d'énergie des photons incidents (pertes optiques) dans les cellules solaires à base de 3C-SiC. Pour améliorer nettement le rendement de ces cellules, il est intéressant d'analyser d'autres facteurs comme le mécanisme de recombinaison en tant que phénomène physique très important lié à l'intensité d'illumination.

Afin de soutenir le phénomène physique de la recombinaison et renforcer l'effet photovoltaïque, l'ajout d'une couche intrinsèque de 3C-SiC et revoir d'autres structures comme (PiN) de cellule solaire à base de 3C-SiC est envisagée dans cette partie.

III.2.5. Etude de l'effet photovoltaïque d'homo-jonction PiN à base de 3C-SiC :

D'après les résultats du tableau III-4 précédent, le bon matériau pour une couche antireflet avec le carbure de silicium dans les structures soit homo-jonction de type PN ou de type PiN est le SnO_2 . Avec le SnO_2 , le rendement des cellules solaires dans les deux structures PN et PiN augmente de 5% à 16%.



Figure III-8 Structure PiN à base de 3C-SiC.

Tableau III-6 Caractéristiques électriques obtenus pour une homo-jonction PiN à base de 3C-SiC

Cellules solaires	V_{co} (v)	J_{co} (mA//cm ²)	FF%	η %
(n-SiC/i-SiC/p- SiC)	1.167646	8.45794702	71.2823	7.0398
(n-ZnO/n-SiC/i-SiC//p-SiC/)	2.498444	8.64085341	74.2321	15.1450
(n-SnO2/n-SiC/i-SiC//p- SiC)	2.499546	8.68882768	75.2551	16.3440

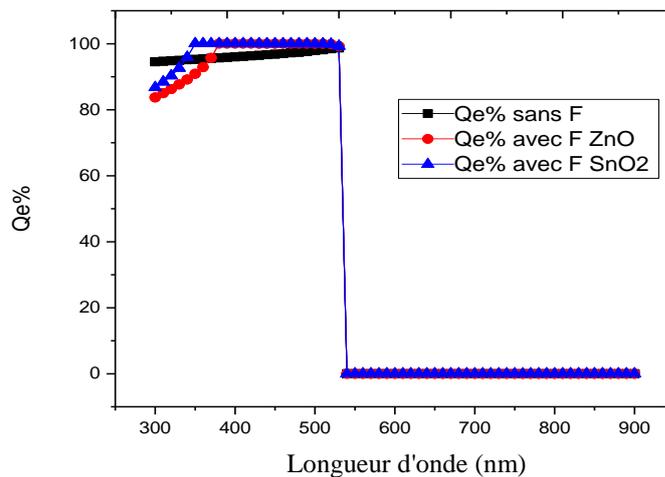


Figure III-9 le rendement quantique de la cellule solaire à base de 3C-SiC (PiN homo-jonction)

III .2.6. L'impact de l'intensité de l'illumination sur les cellules à base de 3C-SiC

Des simulations numériques sont effectuées sur des structures PN et PIN à base de 3C-SiC sous différents conditions d'éclairage: 90 mW.cm⁻², 100 mW.cm⁻² et 135mW.cm⁻² à la température absolue T = 300 K.

Les résultats montrent que le rendement maximum de conversion électrique est entre 23,24% et 23,41% pour les jonctions PN et PIN respectivement, les deux structures proposées sont considérées alors adaptées aux applications de cellules solaires photovoltaïques (PV).

SCAPS est capable de résoudre les équations de base des semi-conducteurs [117], les cellules solaires étudiées sont conçues avec et sans couche mince de SiC intrinsèque et les paramètres utilisés dans les simulations sont présentées dans le tableau III.5.

Tableau III.7: Paramètres utilisés dans la simulation[119]

	<i>p-SiC</i>	<i>n-SiC</i>	<i>i-SiC</i>	<i>n-SnO₂</i>
Thickniss (μm)	1	1.5 (PN) 8 (PiN)	5	0.02
E _g (eV)	2.3	2.3	2.3	3.6
Electron affinity(eV)	3.8	3.8	3.8	4.6
Dielectric constant	9.72	9.72	9.72	9.00
N _c (cm ⁻³)	4.82*10 ¹⁵	4.82*10 ¹⁵	4.82*10 ¹⁵	2.2*10 ¹⁸
N _v (cm ⁻³)	3.2*10 ¹⁵	3.2*10 ¹⁵	3.2*10 ¹⁵	1.8*10 ¹⁹
μ _e (cm ² /v _s)	900	900	900	100
μ _{hole} (cm ² /v _s)	40	40	40	25
N _D (cm ⁻³)	00	10 ¹⁸	00	10 ²⁰
N _A (cm ⁻³)	10 ²⁰	00	00	00
V _e (cm/s)	1*10 ⁷	1*10 ⁷	1*10 ⁷	1*10 ⁷
V _{hole} (cm/s)	1*10 ⁷	1*10 ⁷	1*10 ⁷	1*10 ⁷

La modification de l'intensité lumineuse du faisceau incident sur une cellule solaire a des effets directs sur tous les paramètres de la cellule solaire, notamment le courant de court-circuit, la tension à vide, le facteur de remplissage, le rendement et les résistances série et shunt [118].

Les propriétés photovoltaïques ont été déterminées en utilisant les caractéristiques simulées I-V pour le dispositif étudié sous différentes illuminations, Figure III.10

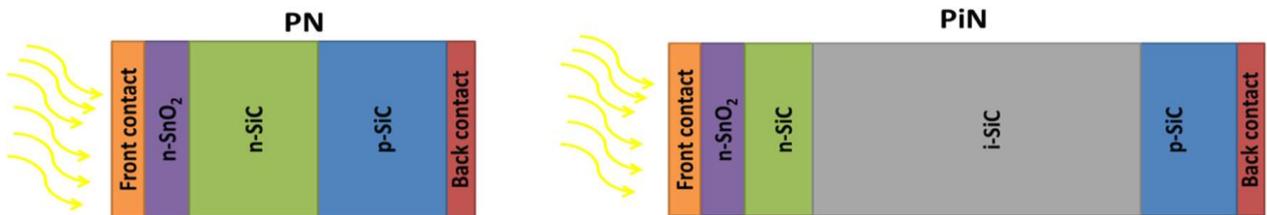


Figure III.10 Structure de la jonction PN et PiN de la cellule solaire à base de 3C-SiC[119].

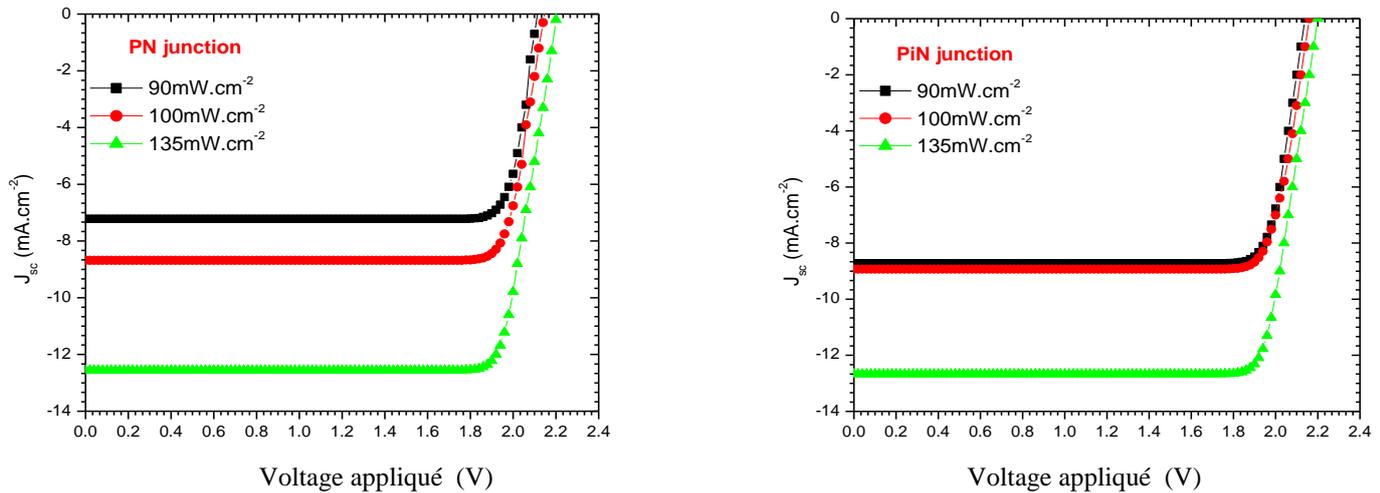


Figure III.11 Caractérisation I-V des structures de jonction (a) PN et (b) PiN.[119].

La Figure III.9: présente les structures des cellules solaires étudiées à base de 3C-SiC. L'utilisation de 3C-SiC à la fois en type n et en type p dans un dispositif à jonction PN a démontré une augmentation de J_{sc} de $7,22\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$ sous l'intensité lumineuse ($90\text{mW}\cdot\text{cm}^{-2}$) et à $12,56\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$ sous l'intensité lumineuse ($135\text{mW}\cdot\text{cm}^{-2}$), Tableau III.6.

Tableau III.8: Propriétés photovoltaïques de cellules étudiées [119].

Intensité lumineuse	$(90\text{mW}\cdot\text{cm}^{-2})$		$(100\text{mW}\cdot\text{cm}^{-2})$		$(135\text{mW}\cdot\text{cm}^{-2})$	
	PN	PiN	PN	PiN	PN	PiN
$V_{co}(\text{V})$	2.14	2.14	2.16	2.16	2.2	2.2
$J_{sc}(\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2})$	7.22	8.72	8.68	8.93	12.56	12.67
FF%	86.4	86.3	85.6	85.6	84.1	84
PCE%	13.35	16.11	16.06	16.51	23.24	23.41

La lumière incidente crée une onde à l'intérieur de la couche absorbante et la variation de l'intensité du champ optique est réduite progressivement à zéro à l'interface de la couche absorbante avec l'électrode selon la relation Lambert-Beer [120]. L'intensité maximale du champ est située à une distance spécifique à l'intérieur de la couche absorbante éloignée de l'électrode, en fonction de l'indice de réfraction et de l'épaisseur de la couche absorbante. Par conséquent, la répartition du champ électrique dans la couche absorbante éloigne la région absorbante de la surface absorbante.

De l'interface à un champ électrique plus élevé, ce qui améliore J_{sc} [121].

Par ailleurs, l'insertion de la couche de i-SiC entre le p-SiC et le n-SiC et la création d'une jonction PiN a sensiblement augmenté J_{sc} de $8,72\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$ sous l'intensité lumineuse ($90\text{mW}\cdot\text{cm}^{-2}$) et à $12,67\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$ sous l'intensité lumineuse ($135\text{mW}\cdot\text{cm}^{-2}$). L'insertion de i-layer et l'insertion de la couche i a entraîné une réponse en longueur d'onde est supérieure à celle de la jonction PN [122]. Le principal avantage de l'utilisation de la structure PiN par rapport à la structure PN est la meilleure réponse en longueur d'onde. En cas d'irradiation à longueur d'onde longue, les photons pénètrent profondément dans la cellule alors que seuls les électrons trous les paires générées dans et à proximité de la région d'épuisement sont associées à la génération actuelle. La région d'appauvrissement d'une structure PiN s'étend à travers la région intrinsèque et permet aux paires d'être générées profondément dans le dispositif; cela augmente l'efficacité quantique de la cellule et donc l'augmentation de J_{sc} [123].

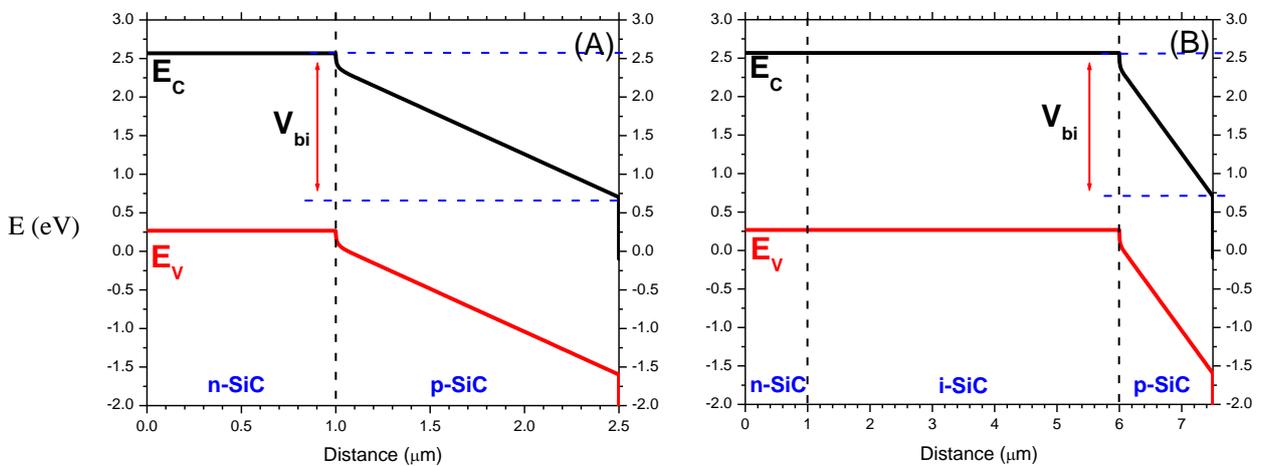


Figure III.12: Niveaux d'énergie de flexion de la bande de la jonction PN et PiN estimés [119].

La Figure III.11 montre la structure de la bande d'énergie estimée par SCAPS. Il est évident que l'insertion de la couche i a entraîné une région d'appauvrissement plus large, comme indiqué sur la Figure III.11B, comparée à une région d'appauvrissement plus petite représentée sur Figure III.11A.

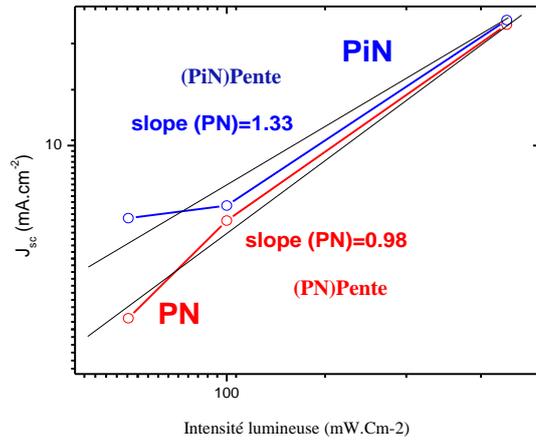


Figure III.13: Densité de courant de court-circuit en fonction de l'intensité lumineuse.[119].

La dépendance de J_{sc} vis-à-vis de l'intensité lumineuse a également été estimée, comme indiqué à la Figure III.12, le mécanisme de recombinaison dominant en court-circuit est indépendant de la présence de lumière; J_{sc} suit la dépendance à la loi de puissance [100]: $J_{sc}=P^\alpha$

Pour vérifier davantage le processus de recombinaison contrôlé, les données estimées ont été ajusté pour calculer les courants de recombinaison; les résultats montrent que le courant de recombinaison est contrôlé par la recombinaison Auger, Figure III.13.

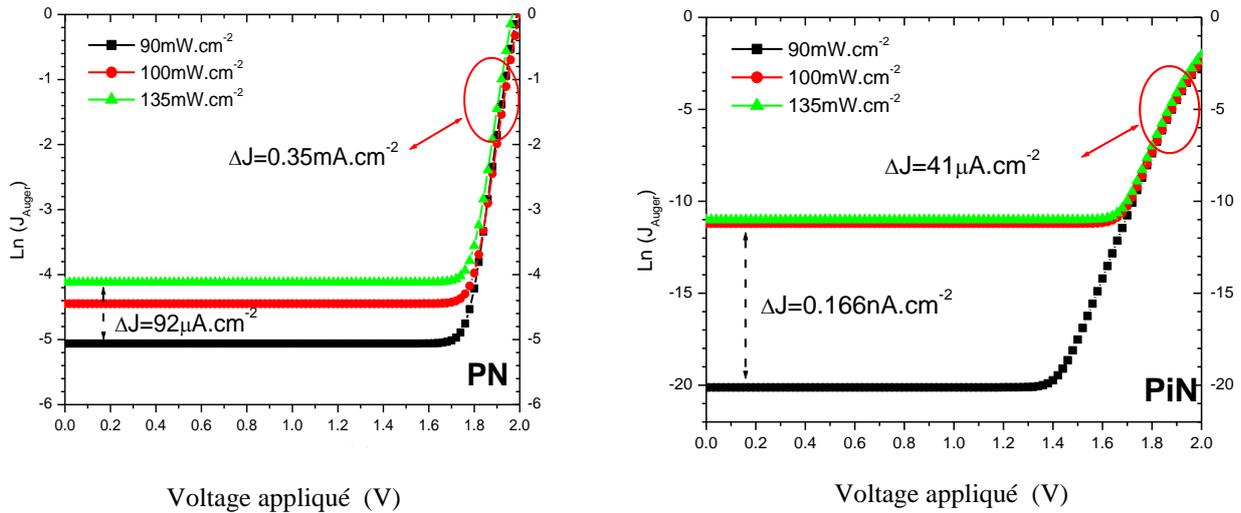


Figure III.14: Courants de recombinaison de vis sans fin en fonction de la tension appliquée pour les jonctions PN et PiN sous différentes intensités d'éclairage.[119].

Une telle recombinaison implique principalement trois transporteurs: une recombinaison d'un électron, un trou dans une transition de bande à bande et l'énergie résultante est donnée au troisième électron ou trou [120].

Les courants de recombinaison Auger sous une intensité lumineuse de 90 mW.cm⁻² ont démontré le taux de recombinaison le plus élevé, réduit par suite de l'augmentation de l'intensité lumineuse à 135 mW.cm⁻². D'autre part, la variation du courant de recombinaison est également affectée par la tension appliquée. Dans le cas d'un dispositif à jonction PN, le courant de recombinaison Auger a diminué d'environ 92 μA.cm⁻² sous faible tension appliquée après augmentation de l'intensité lumineuse, alors qu'à une tension supérieure (près de Voc), cette différence est accentuée pour atteindre 0,35mA.cm⁻², cela est dû à l'action de la recombinaison Auger comme un mécanisme de perte dominant au circuit ouvert [121].

Dans le cas de la jonction PiN, des comportements similaires ont été observés: le courant de recombinaison a diminué d'environ 0,166nA.cm⁻² sous faible tension appliquée après augmentation de l'intensité lumineuse, alors qu'à une tension supérieure (proche de Voc) cette différence a augmenté jusqu'à 41μA.cm⁻². Il est évident que le processus de recombinaison a été remplacé par l'ajout d'une couche i à la structure.

FF a enregistré une légère diminution lors de l'augmentation de l'intensité lumineuse de 86,4% à 84,1% dans les dispositifs à base de PN, tandis que dans les dispositifs à base de PiN, elle est passée de 86,3% à 84%. D'autre part, J_{sc} dépend linéairement de l'intensité de la lumière; Cependant, cette effet n'offre pas une augmentation de l'efficacité, car il augmente également logarithmique la valeur de Voc. Dans les cellules solaires à simple jonction classiques, Voc est généralement déterminé à l'aide du courant de saturation (J_o) [122]:

$$V_{co} = \frac{nkT}{q} \ln\left(\frac{j_{sc}}{j_0} + 1\right) \quad \text{(III-2)}$$

Voc a démontré une légère augmentation avec l'intensité lumineuse de 2,14 V à 2,2 V dans les dispositifs à base de PN et de PiN, respectivement, traduit en conséquence par l'amélioration du taux de génération des porteurs de charge, le niveau de Fermi se rapproche alors de la bande de conduction et de la cantonnière des côtés P et N, augmentant ainsi la valeur Voc.

Typiquement, Voc est une fonction du champ électrique interne appelé potentiel de conduction (V_{bi}) [123]

$$V_{bi} = \frac{kT}{q} 2 \ln \frac{N_D}{N_i} \quad \text{(III-3)}$$

En utilisant les données du tableau 1, on trouve que V_{bi} a pour expression :

$$qV_{bi} = E_g - E_{Fn} - E_{Fp} \quad \text{(III-4)}$$

L'efficacité de conversion de puissance des dispositifs étudiés augmentait lorsque l'intensité de la lumière augmentait. Un dispositif à base de PN a montré un PCE de 13,35% sous une intensité lumineuse de 90 mW.cm^{-2} , augmenté par suite à 16,11% après l'utilisation de la couche i dans un appareil à base de PiN sous la même intensité d'éclairage; l'augmentation a été attribuée à l'augmentation de J_{sc} .

Une augmentation supplémentaire a été observée pour les autres dispositifs avec une augmentation de l'intensité et l'insertion de la couche i. La CEE la plus élevée de 23,41% est enregistrée pour le dispositif à base de PiN sous une intensité lumineuse de 135 mW.cm^{-2}

L'épaisseur de la couche i et la densité de dopant ont un effet important sur les mesures de CV. La largeur d'amortissement augmente avec une polarisation inverse croissante et saturée lorsque la couche i est devenue totalement épuisée. La valeur de la capacité après ce point est appelée capacité de saturation et peut être utilisée pour calculer l'épaisseur de la couche i en utilisant l'équation de la capacité de la plaque parallèle [124]:

$$t = \frac{\epsilon C}{A} \quad (\text{III-5})$$

Où t : épaisseur de la couche i

ϵ : constante diélectrique du matériau

A : surface de contact

C : capacité de saturation.

L'insertion de la couche i a généralement un impact important sur les dispositifs de jonction PN. Les caractéristiques d'obscurité ont été estimées pour les dispositifs à la fois PN et PiN afin d'étudier l'effet de la couche i sur les caractéristiques du dispositif.

La figure 6 présente les caractéristiques de noirceur alternative pour les appareils à l'étude, la capacité du dispositif PN a été réduite à environ 4,8 nF et s'est complètement épuisée après l'addition de la couche i, Figure III.14A. L'augmentation de la conductance est montrée de manière exponentielle impliquant des valeurs plus élevées dans le cas d'un dispositif PiN, figure 6B. Normalement.

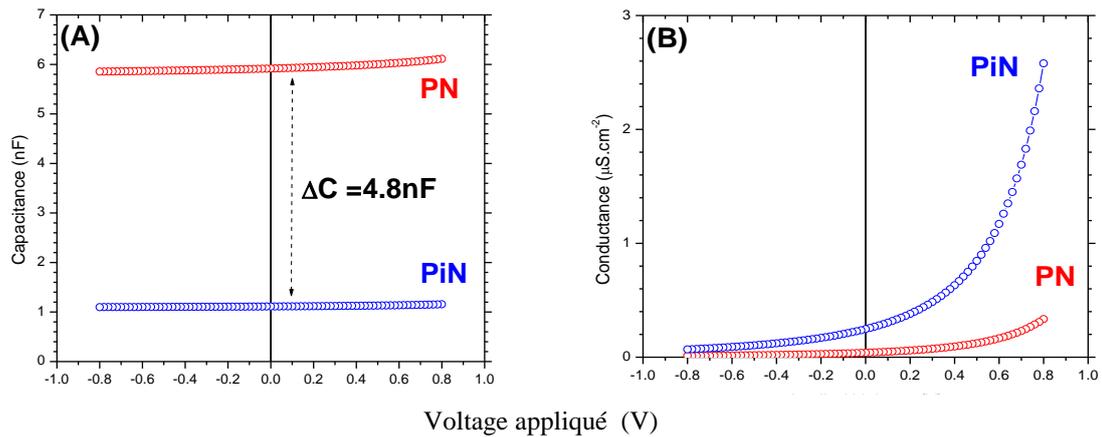


Figure III.15: (A) Capacitance en fonction de la tension appliquée, (B) Conductance en fonction de la tension appliquée, pour les jonctions PN et PiN[119].

Conclusion

L'utilisation de la couche i dans les cellules solaires à base de SiC améliore considérablement les performances du dispositif sous différentes intensités lumineuses, de $90 \text{ mW}\cdot\text{cm}^{-2}$ à $135 \text{ mW}\cdot\text{cm}^{-2}$, appliquées sur la cellule solaire à base de 3C-SiC dans SCAPS.

Le rendement de la conversion énergétique maximale de 23,24% et 23,41% pour les jonctions PN et PIN, a été respectivement enregistrée [119].

Les résultats simulés démontrent que le courant de recombinaison est contrôlé par la recombinaison Auger et implique en même temps les pertes de porteurs de charge dans la couche d'absorbeur contrôlées par un processus de recombinaison.

Le mécanisme de recombinaison dominant en court-circuit est indépendant de la présence de lumière [119].

Conclusion générale et perspectives

L'étude réalisée grâce au code Wien2k a permis d'identifier les propriétés physiques, en particulier les propriétés structurales et électroniques du composant binaire du Silicium avec le carbone dite « carbure de Silicium » où des résultats intéressants ont été le succès de cette partie comme :

- Les propriétés électroniques du 3C-SiC dans les approximations GGA et MBj intégrées dans le code Wien2K et qui correspondaient aux résultats expérimentaux calculés dans d'autres travaux de recherche signalés dans la littérature
- Le composant est un matériau ayant une large bande interdite.
- L'efficacité de l'usage de carbure de Silicium dans les composants électroniques grâce à sa dureté et son bon rendement à hautes températures.

En outre, nous avons mentionné auparavant l'importance de ces matériaux du fait qu'ils peuvent constituer une alternative à d'autres, comme le Cadmium ce qui lui permet d'avoir une diversité d'applications dans le domaine des cellules photovoltaïques.

Dans une deuxième partie, était nécessaire de chercher une confirmation aux résultats précédents grâce au SCAPS-1D basé sur la simulation numérique notamment pour le carbure de Silicium qui possède la particularité d'un matériau important dans la structure d'une cellule photovoltaïque avec le PN et PiN pour l'avantage de fournir un rendement assez significatif en dépassant les 20% par ajustement et contrôle de plusieurs facteurs technologiques exposés sous différentes conditions durant cette partie d'étude.

L'utilisation du code Wien2K et du SCAPS-1D était complémentaire dans ce travail de thèse pour l'objectif d'exposer un nouveau matériau binaire utile avec ces propriétés importantes dans la fabrication des cellules solaires et tenter ainsi de mettre un élément de plus au développement des énergies renouvelables.

Comme perspectives qui peuvent succéder cet axe de recherche, il est très objectif de souhaiter une amélioration de plus du rendement de la cellule et franchir le barrière des 25% par l'évolution des différentes propriétés du matériau en utilisant d'autres techniques et outils de calcul et de simulation notamment ceux liés à l'intelligence artificielle.

Bibliographie

- [1] Podes, R., & Diouf, B. (2011). *Solar lighting*. Springer Science & Business Media. S. R. Wenham, M. A. Green, M. E. Watt, and R. Corkish, *Applied Photovoltaics*, 2nd ed. London, UK:Earthscan, 2007.
- [2] DJERIOUAT, K. (2010). Optimisation du rendement des cellules photovoltaïques à hétérojonctions GaInP/GaAs.
- [3] Navarro, J. M. (2008). *Cellules photovoltaïques organiques transparentes dans le visible* (Doctoral dissertation, Université de Toulouse, Université Toulouse III-Paul Sabatier).
- [4] Tan, Y. T. (2004). Impact on the power system with a large penetration of photovoltaic generation. *The University of Manchester Institute of Science and Technology*
- [5] Oleksiy, N. (2005). Simulation, fabrication et analyse de cellules photovoltaïques à contacts arrière interdigités. *Institut national des sciences appliquées de Lyon..*
- [6] Sze, S. M. (2008). *Semiconductor devices: physics and technology*. John Wiley & Sons.
- [7] Tafticht, T. (2006). *Analyse et commande d'un système hybride photovoltaïque éolien* (Doctoral dissertation, Université du Québec à Trois-Rivières)
- [8] Neville, R. C. (1995). *Solar energy conversion: the solar cell*. Elsevier.
- [9] Allard, B., Coquery, G., Dupont, L., Khatir, Z., Lazar, M., Lefebvre, S., ... & Planson, D. (2005). Composants à semi-conducteur de puissance pour des applications à haute température de fonctionnement. *J3eA*, 4, 010.
- [10] Allard, B., Coquery, G., Dupont, L., Khatir, Z., Lazar, M., Lefebvre, S., ... & Planson, D. (2005). Composants à semi-conducteur de puissance pour des applications à haute température de fonctionnement. *J3eA*, 4, 010.
- [11] BENSMAIN, A. (2018). *Investigation de l'ingénierie de bandes des cellules solaires à hétérojonction a-Si: H/c-Si: Modélisation et simulation numérique* (Doctoral dissertation).
- [12] Diouf, D. (2010). *Cellules photovoltaïques silicium à hétérojonctions et à structures interdigitée en face arrière* (Doctoral dissertation, Paris 11).
- [13] <http://tpep.free.fr/effetphotovoltaique/fonctionnement/fonctionnement.html>
- [14] Lachaume, R. (2014). *Contribution à la caractérisation électrique et à la simulation numérique des cellules photovoltaïques silicium à hétérojonction* (Doctoral dissertation, Grenoble).
- [15] BENSMAIN, A. (2018). *Investigation de l'ingénierie de bandes des cellules solaires à hétérojonction a-Si: H/c-Si: Modélisation et simulation numérique* (Doctoral dissertation).
- [16] Gorge, V. (2012). *Caractérisations de matériaux et tests de composants des cellules solaires à base des nitrures des éléments III-V* (Doctoral dissertation, Paris 11).
- [17] Mcevoy, A., & Markvart, T. (2012). L. Casta ner. Practical Handbook of Photovoltaics: Fundamentals and Applications
- [18] <http://www.pveducation.org/pvcdrom/pn-junction/types-of-recombination>

- [19] Mesrane, A., Rahmoune, F., Mahrane, A., & Oulebsir, A. (2015). Design and Simulation of InGaN-Junction Solar Cell. *International Journal of Photoenergy*, 2015.
- [20] <http://tpep.free.fr/effetphotovoltaique/histoire/histoire.html>.
- [21] Becquerel, E. (1839). On electric effects under the influence of solar radiation. *Compt. Rend.*, 9, 561.
- [22] <http://tpep.free.fr/effetphotovoltaique/histoire/histoire.html>.
- [23] Bendib, B. (2018). *Une nouvelle approche de modélisation et de commande des systèmes photovoltaïques autonomes* (Doctoral dissertation).
- [24] Lachaume, R. (2014). *Contribution à la caractérisation électrique et à la simulation numérique des cellules photovoltaïques silicium à hétérojonction* (Doctoral dissertation, Grenoble).
- [25] Dzimano, G. J. (2008). *Modeling of photovoltaic systems* (Doctoral dissertation, The Ohio State University).
- [26] Labouret, A., & Viloz, M. (2006). *Energie solaire photovoltaïque* (Vol. 4). Dunod.
- [27] Bagher, A. M., Vahid, M. M. A., & Mohsen, M. (2015). Types of solar cells and application. *American Journal of optics and Photonics*, 3(5), 94-113.
- [28] Statistics, R. C. (2016). International Renewable Energy Agency (IRENA).
- [29] MOSTEFA KARA, S. *ETUDE ET SIMULATION DE CELLULES PHOTOVOLTAÏQUES A COUCHES MINCES A BASE DE CIS et CIGS* (Doctoral dissertation).
- [30] Luque, A., & Hegedus, S. (Eds.). (2011). *Handbook of photovoltaic science and engineering*. John Wiley & Sons.
- [31] Sharma, S., Jain, K. K., & Sharma, A. (2015). Solar cell: In Research and Application—A Review Materials Sciences and Applications.
- [32] Labouret, A., & Viloz, M. (2006). *Energie solaire photovoltaïque* (Vol. 4). Dunod.
- [33] Labouret, A., & Viloz, M. (2003). *Energie solaire photovoltaïque: le manuel du professionnel*. Dunod.
- [34] PENSL, G., CIOBANU, F., FRANK, T., KRIEGER, M., RESHANOV, S., SCHMID, F., & WEIDNER, M. (2006). Sic material properties. In *Sic Materials And Devices: Volume 1* (pp. 1-41).
- [35] Knippenberg, W. F. (1963). Growth phenomena in silicon carbide. *Philips Research Report*, 18, 161-274.
- [36] Wellenhofer, G., & Rössler, U. (1997). Global band structure and near-band-edge states. *physica status solidi (b)*, 202(1), 107-123.
- [37] Bechstedt, F., Käckell, P., Zywietz, A., Karch, K., Adolph, B., Tenelsen, K., & Furthmüller, J. (1997). Polytypism and properties of silicon carbide. *physica status solidi (b)*, 202(1), 35-62.
- [38] Van Haeringen, W., Bobbert, P. A., & Backes, W. H. (1997). On the band gap variation in SiC polytypes. *physica status solidi (b)*, 202(1), 63-79.

- [39] Lambrecht, W. R., Limpijumng, S., Rashkeev, S. N., & Segall, B. (1997). Electronic band structure of SiC polytypes: A discussion of theory and experiment. *physica status solidi (b)*, 202(1), 5-33.
- [40] Junginger, H. G., & Van Haeringen, W. (1970). Energy band structures of four polytypes of Silicon Carbide calculated with the empirical pseudopotential method. *physica status solidi (b)*, 37(2), 709-719.
- [41] Choyke, W. J., & Patrick, L. Y. L. E. (1960). Absorption of light in alpha silicon carbide near the band edge. *Silicon Carbide*, 306-311.
- [42] Sergey, R. (Ed.). (2006). *Sic Materials And Devices-Volume 1* (Vol. 40). World Scientific..
- [43] Katagiri, H., Saitoh, K., Washio, T., Shinohara, H., Kurumadani, T., & Miyajima, S. (2001). Development of thin film solar cell based on Cu₂ZnSnS₄ thin films. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 65(1-4), 141-148.
- [44] Lippens, P. E. (1999). Matériaux complexes.
- [45] TOUAM, S. (2015). *Etude de 1 er principe des propriétés fondamentales des alliages quaternaires* (Doctoral dissertation, BADJI MOKHTAR UNIVERSITY).
- [46] Born, M., & Oppenheimer, R. (1927). Zur quantentheorie der molekeln. *Annalen der physik*, 389(20), 457-484.
- [47] Born, M., & Oppenheimer, J. R. (1927). On the quantum theory of molecules
- [48] Andersen, O. K. (1975). Linear methods in band theory. *Physical Review B*, 12(8), 3060.
- [49] Loucks, T. L. (1967). Augmented plane wave method: a guide to performing electronic structure calculations.
- [50] Tsidilkovski, I. M. (2016). *Band Structure of Semiconductors: International Series on the Science of the Solid State* (Vol. 19). Elsevier.
- [51] Gombás, P. (1950). Die Methode des «self-consistent field». In *Theorie und Lösungsmethoden des Mehrteilchenproblems der Wellenmechanik* (pp. 218-231). Birkhäuser, Basel.
- [52] Hohenberg, P., & Kohn, W. (1964). Inhomogeneous electron gas physical review 136. B864.
- [53] Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical review*, 140(4A), A1133.
- [54] Ortiz, G. (1992). Gradient-corrected pseudopotential calculations in semiconductors. *Physical Review B*, 45(19), 11328.
- [55] Bowen, C., Sugiyama, G., & Alder, B. J. (1994). Static dielectric response of the electron gas. *Physical Review B*, 50(20), 14838.
- [56] Hohenberg, P., & Kohn, W. (1964). Phys Rev 136: B864. *Kohn W, Sham LJ (1965) Phys Rev, 140, A1133.*
- [57] Singh, D. (1991). Ground-state properties of lanthanum: Treatment of extended-core states. *Physical Review B*, 43(8), 6388.
- [58] Cottenier, S. (2002). Density Functional Theory and the family of (L) APW-methods: a step-by-step introduction. *Instituut voor Kern-en Stralingsfysica, KU Leuven, Belgium*, 4(0), 41.

- [59] Hedin, L., & Lundqvist, B. I. (1971). Explicit local exchange-correlation potentials. *Journal of Physics C: Solid state physics*, 4(14), 2064.
- [60] Perdew, J. P., & Wang, Y. (2018). Erratum: Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy [Phys. Rev. B 45, 13244 (1992)]. *Physical Review B*, 98(7), 079904.
- [61] Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical review*, 140(4A), A1133.
- [62] Tsidilkovski, I. M. (1982). Band structure of semiconductors, *Int. Ser. Sci. Solid State*.
- [63] Slater, J. C., & Phillips, J. C. (1974). Quantum theory of molecules and solids Vol. 4: the self-consistent field for molecules and solids. *PhT*, 27(12), 49.
- [64] Sjöstedt, E., Nordström, L., & Singh, D. J. (2000). An alternative way of linearizing the augmented plane-wave method. *Solid state communications*, 114(1), 15-20.
- [65] Hamann, D. R. (1979). Semiconductor charge densities with hard-core and soft-core pseudopotentials. *Physical Review Letters*, 42(10), 662.
- [66] Schwartz, P. B. P., & Luitz, J. (1990). WIEN97, Vienna University of Technology. Improved and updated Unix version of the copyrighted WIEN code; P. Blaha, P. Schwartz, P. Sorantin, and SB Trickey. *Comput. Phys. Commun*, 59, 399.
- [67] Blaha, P., Schwarz, K., Madsen, G. K., Kvasnicka, D., & Luitz, J. (2001). wien2k. *An augmented plane wave+ local orbitals program for calculating crystal properties*.
- [68] Anderson, G. (1975). Coring and core analysis handbook.
- [69] Takeda, T., & Kubler, J. (1979). Linear augmented plane wave method for self-consistent calculations. *Journal of Physics F: Metal Physics*, 9(4), 661.
- [70] Smrčka, L. (1984). Linearized augmented plane wave method utilizing the quadratic energy expansion of radial wave functions. *Czechoslovak Journal of Physics B*, 34(7), 694-704.
- [71] Marouf, Y. (2013). Modélisation des cellules solaires en InGaN en utilisant AtlasSilvaco. *mémoire de Magister, Université Mohamed Khider–Biskra*.
- [72] Selberherr, S. (2012). *Analysis and simulation of semiconductor devices*. Springer Science & Business Media.
- [73] Pinto, M. R., Rafferty, C. S., & Dutton, R. W. (1984). *PISCES II: Poisson and continuity equation solver*.
- [74] Jabr, R. A., Hamad, M., & Mohanna, Y. M. (2007). Newton-Raphson solution of Poisson's equation in a pn diode. *International Journal of Electrical Engineering Education*, 44(1), 23-33.
- [75] Shaughnessy, D. J., Evans, G. R., & Darby, M. I. (1987). An improved LAPW method for the calculation of self-consistent electronic band structures. *Journal of Physics F: Metal Physics*, 17(8), 1671.
- [76] Harris, G. L. (1995). 1.5 Young's modulus of SiC. *Properties of Silicon Carbide*, 5(13), 6.

- [77] Chen, A. B., & Srichaikul, P. (1997). Shallow donor levels and the conduction band edge structures in polytypes of SiC. *physica status solidi (b)*, 202(1), 81-106.
- [78] Furthmüller, J., Käckell, P., Bechstedt, F., Fissel, A., Pfennighaus, K., Schröter, B., & Richter, W. (1998). Model of the epitaxial growth of SiC-polytypes under surface-stabilized conditions. *Journal of electronic materials*, 27(7), 848-852.
- [79] Stockmeier, M., Müller, R., Sakwe, S. A., Wellmann, P. J., & Magerl, A. (2009). On the lattice parameters of silicon carbide. *Journal of Applied Physics*, 105(3), 033511.
- [80] Veschetti, Y. (2005). *Modélisation, caractérisation et réalisation de nouvelles structures photovoltaïques sur substrat de silicium mince* (Doctoral dissertation, Strasbourg 1).
- [81] Simya, O. K., Mahaboobatcha, A., & Balachander, K. (2015). A comparative study on the performance of Kesterite based thin film solar cells using SCAPS simulation program. *Superlattices and Microstructures*, 82, 248-261.
- [82] Burgelman, M., Decock, K., Niemegeers, A., Verschraegen, J., & Degraeve, S. (2016). SCAPS manual.
- [83] Baig, F., Ullah, H., Khattak, Y. H., & Soucase, B. M. (2016, November). Numerical analysis of SnS Photovoltaic cells. In *2016 International Renewable and Sustainable Energy Conference (IRSEC)* (pp. 596-600). IEEE.
- [84] Perthue, A. (2014). *Vers une amélioration des performances et de la durabilité de cellules photovoltaïques organiques par l'application d'un film composite multifonctionnel* (Doctoral dissertation, Université Blaise Pascal-Clermont-Ferrand II).
- [85] Furthmüller, J., Käckell, P., Bechstedt, F., Fissel, A., Pfennighaus, K., Schröter, B., & Richter, W. (1998). Model of the epitaxial growth of SiC-polytypes under surface-stabilized conditions. *Journal of electronic materials*, 27(7), 848-852..
- [86] Chen, A. B., & Srichaikul, P. (1997). Shallow donor levels and the conduction band edge structures in polytypes of SiC. *physica status solidi (b)*, 202(1), 81-106.
- [87] Schulz, H., & Thiemann, K. H. (1979). Structure parameters and polarity of the wurtzite type compounds SiC—2H and ZnO. *Solid State Communications*, 32(9), 783-785.
- [88] Stockmeier, M., Müller, R., Sakwe, S. A., Wellmann, P. J., & Magerl, A. (2009). On the lattice parameters of silicon carbide. *Journal of Applied Physics*, 105(3), 033511.
- [89] Yoshida, S. (1995). 32 Effective masses in SiC. *Properties of Silicon Carbide*, (13).
- [90] Choyke, W. J., & Patrick, L. (1970). Luminescence of donor-acceptor pairs in cubic SiC. *Physical Review B*, 2(12), 4959.
- [91] Choyke, W. J., & Palik, E. D. (1997). Silicon Carbide (SiC). In *Handbook of Optical Constants of Solids* (pp. 587-595). Academic Press.
- [92] Patrick, L., & Choyke, W. J. (1970). Static dielectric constant of SiC. *Physical Review B*, 2(6), 2255.
- [93] Choyke, W. J., & Patrick, L. (1971). Photoluminescence of radiation defects in cubic SiC: localized modes and Jahn-Teller effect. *Physical Review B*, 4(6), 1843.

- [94] Wiech, G., & Fabian, D. J. (1968). Soft X-ray band spectra and the electronic structure of metals and materials. *by DJ Fabian, Academic Press, London and New York.*
- [95] Yoshida, S. (1995). 32 Effective masses in SiC. *Properties of Silicon Carbide*, (13).
- [96] Bassani, F., & Yoshimine, M. (1963). Electronic band structure of group IV elements and of III-V compounds. *Physical Review*, 130(1), 20.
- [97] Herman, F., Van Dyke, J. P., & Kortum, R. L. (1969). Electronic structure and optical spectrum of silicon carbide. In *Silicon Carbide—1968* (pp. S167-S178). Pergamon.
- [98] Van Haeringen, W., & Junginger, H. G. (1969). Empirical pseudopotential approach to the band structures of diamond and silicon carbide. *Solid State Communications*, 7(16), 1135-1137.
- [99] Herman, F., Kortum, R. L., Ortenburger, I. B., & Van Dyke, J. P. (1969). *ELECTRONIC STRUCTURE AND OPTICAL SPECTRUM OF SEMICONDUCTORS*. LOCKHEED MISSILES AND SPACE CO PALO ALTO CALIF LOCKHEED RESEARCH LAB.
- [100] Van Haeringen, W., & Junginger, H. G. (1969). Empirical pseudopotential approach to the band structures of diamond and silicon carbide. *Solid State Communications*, 7(16), 1135-1137.
- [101] Junginger, H. G., & Van Haeringen, W. (1970). Energy band structures of four polytypes of Silicon Carbide calculated with the empirical pseudopotential method. *physica status solidi (b)*, 37(2), 709-719.
- [102] Junginger, H. G., & Van Haeringen, W. (1970). Energy band structures of four polytypes of Silicon Carbide calculated with the empirical pseudopotential method. *physica status solidi (b)*, 37(2), 709-719.
- [103] Hemstreet Jr, L. A., & Fong, C. Y. (1972). Electronic Band Structure and Optical Properties of 3 C-SiC, BP, and BN. *Physical Review B*, 6(4), 1464.
- [104] Mahmood, A., & Sansoresa, L. E. (2002). The band structure and bulk modulus of cubic (3C) and hexagonal (2H) polytypes of silicon carbide. *Modern Physics Letters B*, 16(10n11), 383-392.
- [105] Marshall, R. C., Faust Jr, J. W., Ryan, C. E., & Stringfellow, G. B. (1977). Silicon Carbide—1973. *Journal of The Electrochemical Society*, 124(6), 217C.
- [106] Gavrilenko, V. I., Postnikov, A. V., Klyui, N. I., & Litovchenko, V. G. (1990). Energy Band Structure and Optical Properties of Wurtzite-Structure Silicon Carbide Crystals. *physica status solidi (b)*, 162(2), 477-487.
- [107] Gavrilenko, V. I., Frolov, S. I., & Klyui, N. I. (1993). Electronic band structure and optical properties of cubic silicon carbide crystals. *Physica B: Condensed Matter*, 185(1-4), 394-399.
- [108] Herman, F., Van Dyke, J. P., & Kortum, R. L. (1969). Electronic structure and optical spectrum of silicon carbide. In *Silicon Carbide—1968* (pp. S167-S178). Pergamon.

- [109] Ballandovich, V. S., Tairov, Y. M., & Violina, G. N. (1981). Acceptor boron in α -SiC (6H): Investigation by the photocapacitance method. *physica status solidi (a)*, 65(2), 709-716.
- [110] Burgelman, M., & Marlein, J. (2008, September). Analysis of graded band gap solar cells with SCAPS. In *Proceedings of the 23rd European Photovoltaic Solar Energy Conference, Valencia* (pp. 2151-2155).
- [111] Zerfaoui, H., Dib, D., Rahmani, M., Benyelloul, K., & Mebarkia, C. (2016, July). Study by simulation of the SnO₂ and ZnO anti-reflection layers in n-SiC/p-SiC solar cells. In *AIP Conference Proceedings* (Vol. 1758, No. 1, p. 030029). AIP Publishing LLC.
- [112] Oleksiy, N. (2005). Simulation, fabrication et analyse de cellules photovoltaïques à contacts arrières interdigités. *Institut national des sciences appliquées de Lyon*.
- [113] Amin, N., Tang, M., & Sopian, K. (2007, December). Numerical modeling of the copper-indium-selenium (CIS) based solar cell performance by AMPS-1D. In *2007 5th Student Conference on Research and Development* (pp. 1-6). IEEE.
- [114] Papet, P. (2007). Nouveaux concepts pour la réalisation de cellules photovoltaïques à contacts interdigités sur substrats minces en silicium cristallin. *Institut National des Sciences Appliquées de Lyon*.
- [115] Kraiem, J. (2005). *Epitaxie et transfert de films minces de silicium pour applications photovoltaïques* (Doctoral dissertation, Lyon, INSA).
- [116] Favre, W. (2011). *Silicium de type n pour cellules à hétérojonctions: caractérisations et modélisations* (Doctoral dissertation, Paris 11).
- [117] Labouret, A., & Viloz, M. (2006). *Energie solaire photovoltaïque* (Vol. 4). Dunod.
- [118] Hassane, B., Dennai, B., & Hemlaoui, A. (2011). Modélisation d'un système dichroïque couplé en série. *Revue des énergies renouvelables*, 14(4), 699-706.
- [119] Zerfaoui, H., Dib, D., & Kadem, B. (2019). The simulated effects of different light intensities on the SiC-based solar cells. *Silicon*, 11(4), 1917-1923.
- [120] Paynter, R. W. (1981). Modification of the Beer-Lambert equation for application to concentration gradients. *Surface and Interface analysis*, 3(4), 186-187.
- [121] Chen, L. M., Xu, Z., Hong, Z., & Yang, Y. (2010). Interface investigation and engineering—achieving high performance polymer photovoltaic devices. *Journal of Materials Chemistry*, 20(13), 2575-2598.
- [122] Fujita, S. (2015). Wide-bandgap semiconductor materials: For their full bloom. *Japanese journal of applied physics*, 54(3), 030101.
- [123] McIntosh, K. R., Lau, G., Cotsell, J. N., Hanton, K., Bätzner, D. L., Bettiol, F., & Richards, B. S. (2009). Increase in external quantum efficiency of encapsulated silicon solar cells from a luminescent down-shifting layer. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 17(3), 191-197.
- [124] Park, Y., Noh, S., Lee, D., Kim, J. Y., & Lee, C. (2011). Temperature and light intensity dependence of polymer solar cells with MoO₃ and PEDOT: PSS as a buffer layer. *J. Korean Phys. Soc*, 59(2), 362-366.

