

RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHECHE SCIENTIFIQUE

UNIVERISTIÉ LARBI TEBESSI – TÉBESSA



Faculté des Science Exactes et des Science de la Nature et de la Vie DÉPARTEMENT : Science de la matière

MÉMOIRE DE MASTER

Domaine : Sciences de la Matière

Filière : Physique

Option : Physique des matériaux

Thème

Modélisation de la diffusion des dopants dans le silicium pour la réalisation des cellules photovoltaïques.

Par

ACHAICHIA Sara&TAHRI Zineb Soutenue le: 29 /06/2020

Devant le jury:

Président:	Ben Khdhir Mohamed Lotfi	Pr	Université Larbi Tebessi - Tébessa
Rapporteur:	SaouaneIzzeddine	MAA	Université Larbi Tebessi - Tébessa
Examinateur:	BelghithHana	MCB	Université Larbi Tebessi - Tébessa



République Algérienne Démocratique et Populaire Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique Université Larbi Tébessa –Tébessa Faculté des Science Exactes et des Sciences de la Nature et de la Viere mar



Déclaration sur l'honneur de non-Plagiat

(À joindre obligatoirement au mémoire; Remplie et signed

Nous soussignions

Nom, prénom: A chaichia Sara & Tahri zaineb. Nº de carte d'étudiant: (1) M20153403808(2) M201534025470 Régulièrement inscrits (es) en Master au Département Sciences de la Matière Année universitaire:2019/2020 Domaine: Sciences de la matière Filière: Physique Spécialité: physique des matérioux Intitulé du mémoire: Modélisation de la diffusion des des cellules photoroltaiques.

Attestons que notre mémoire est un travail original et que toutes les sources utilisées ont été indiquées dans leur totalité. Nous certifions également que nous n'avons ni recopié ni utilisé des idées ou des formulations tirées d'un ouvrage, article, ou mémoire, en version imprimée ou électronique, sans mentionner précisément leur origine et que les citations intégrales sont signalées entre guillemets.

Sanctions en cas de plagiat prouvé:

Les étudiants seront convoqués devant le conseil de discipline, les sanctions prévues selon la gravité du plagiat sont:

- L'annulation du mémoire avec possibilité de le refaire sur un sujet différent.

- L'exclusion d'une année du master.



Fait à Tébessa, le:

Signature des étudiants (es):



Formulaire de levée de réserves après soutenance d'un Mémoire de Master

Données d'identification du candidat (e) :
Nom et prénom du candidat : Achanic Price Sara et Talhra Laureb
Intitulé du Sujet: Ho de lisata on de la shillerron dels
desparate dans le salicum pour la
réalisation des ulle les prive terrettanque
Données d'identification du membre de jury :
Nom et prénom : cost to vit is
Grade:
Lieu d'exercice : Université Larbi Tebessi- Tébessa
Vu le procès-verbal de soutenance du mémoire sus citée comportant les réserves suivantes :
/
The survive second state of the stress of second stress survives the second stress str
Et apres constatation des modifications et corrections sulvantes :

Je déclare en ma qualité de président de jury de soutenance que le mémoire cité remplit toutes les conditions exigées et permet au candidat de déposer son mémoire en vue de l'obtention de l'attestation de succès.

Le 15/11/ 20 200

Président de jury de soutenance : (Nom/Prénom et signature)

الملخص

تعتبر الطاقة الكهربائية أحد العوامل الرئيسية الحاسمة في الحياة ، ويتزايد الطلب عليها بكثرة في جميع أنحاء العالم.

ومن بين المصادر المتنوعة للطاقة، هناك طاقة متجددة تعتبر طاقة غير محدودة ، و بالخصوص الطاقة الشمسية. و هذه الطاقة تمثل أكبر مصدر للطاقة بسبب فوائدها الكثيرة.

في هذه المذكرة سنقوم ينمذجة و محاكاة انتشار البور في السيلكون الكهروضوئي. الهدف من هذا العمل هو دراسة العوامل المؤثرة على التطعيم (الزمن, الحرارة)التركيز على مردود الباعث.

نتائج المحاكاة المتحصل عليها تمت بواسطة: PC1D, PC2D, PC2D, PC3P, PC3P, PVsys

الكلمات المفتاحية: الضوئية، النمذجة، الباعث الانتشار .

Résumé

L'énergie électrique est considérée comme un des principaux facteurs essentiels dans la vie, sa demande augmente d'une façon exponentielle dans le monde.

Parmi la variété des sources d'énergies, il y a les énergies renouvelables qui sont considérées comme énergie inépuisables, en particulier l'énergie photovoltaïque. Cette énergie représente la plus grande source d'énergie à cause de ses nombreux avantages.

Dans ce mémoire, nous analysons la modélisation et la simulation de la diffusion de bore dans le silicium photovoltaïque.

L'objectif de ce travail permis d'évaluer l'influence des paramètres de dopage (temps, température et concentration de surface) sur le rendement de l'émetteur.

Les résultats de la simulation sont obtenus par MATLAB et PC1D, PC2D et PV Sys.

Mots clés : Photovoltaïque, émetteur, Diffusion, dopants.



The electrical energy is considered as one of the main essential factors in life, its demand increases exponentially in the world. Among the variety of energy sources, there are renewable energies that are considered inexhaustible energy, especially photovoltaic energy. This energy represents the largest source of energy for its many advantages.

In this thesis, we analyze the modeling and the simulation of boron diffusion in photovoltaic silicon.

The objective of this work allowed toassess the influence of doping parameters (time, temperature and surface concentration) diffusion on the performance of the transmitter.

The results of the simulation obtained by MATLAB and PC1D, PC2D and PV Sys.

Keywords: Photovoltaic, Modeling, transmitter, Diffusion.

Remerciement

Avant tout nous remercions dieu qui nous a donné la force et la patience de terminer ce travail.

Nous tenons grand merci à notre encadreur **Dr** SaouaneIzzeddinepour les efforts faits durant l'année universitaire, et pour leurs conseils précieux.

Je voudrait également remercier les membres du jury pour avoir accepté L'évaluation de ce travail et pour toutes leurs remarques et critiques : **Pr Ben khdhir Mohamed Lotfi**pour l'honneur qu'il nous a fait en acceptant présider le jury de cette soutenance et ou Dr **BelghithHana**pour avoir acceptée d'examiner ce travail.

Nous remercions tous les enseignants de département de Science matière.

Enfin nous tenons à remercier tous ceux ou celles qui ont eu l'honneur, de prés ou de loin, à nous aider à présenter ce travail.

Sara IZaineb

Dédicace

Tous les mots ne sauraient exprimer la gratitude, l'amour, le respect, la reconnaissance, c'est tous simplement que Je dédie ce travail :

Spécialement à mes chers parents : (Redouane et Sabah)

Mon pére : A l'homme de ma vie, mon exemple éternel, mon soutien moral et source de joie et de bonheur, celui qui s'est toujours sacrifié pour me voir réussir, que dieu te garde dans son vaste paradis, à toi mon père.

Ma mére : A la lumière de mes jours, la source de mes efforts, la flamme de mon cœur, ma vie et mon bonheur ; maman que j'adore.

A MON CHER MARI AbdRaouf: Merci pour ton amour, ton soutien et tes encouragements qui ont toujours été pour moi d' un grand réconfort. Merci pour ta gentillesse et ton sens du sacrifice. Je t' aime tout simplement.

A MA PETITE FILLERoudina

Avant même que mes yeux ne te voient ma chérie, mon amour et mon affection pour toi n'ont pas cessé de s'accroître de jour en jour. Ton sourire illumine ma vie et la rend plus joyeuse et pleine de sens. Tu as partagé avec moi cette aventure avant même ta naissance et tu continues à la vivre avec moi chaque instant. A toi ma chérie je dédie ce modeste travail en implorant DIEU le tout puissant de te garder pour tes parents qui t'adorent. Je t'aime ma puce.

A mes fréresRamzi et SaajedJe ne peux exprimer à travers ces lignes tous mes sentiments d'amour et de tendresse envers vous deux mes chers frères.

Ma deuxiémefamile**Ma belle méreHada,mon beau pérebekhouche,mes beau** fréressayef,mohamed et Linda,Taimasofiane

Ma cher amieet mes soeurs Asma, Selma, Je t' aime tout simplement avec tes enfants Loulou alaa, salsabilsans oublier tata latifa et mon oncle ABD ALLAH

Sara

Ma cher binome Zaineb d'avoir eu le courage d'achever ce travail.

Dédicace

À MES CHERS PARENTS : Aucune dédicace ne saurait exprimer mon respect, mon amour éternel et ma considération pour les sacrifices que vous avez consenti pour mon instruction et mon bien être.

Je vous remercie pour tout le soutien et l'amour que vous me portez depuis mon enfance et j'espère que votre bénédiction m'accompagne toujours.

Que ce modeste travail soit l'exaucement de vos vœux tant formulés, le fruit de vos innombrables sacrifices, bien que je ne vous en acquitterai jamais assez.

Puisse Dieu, le Très Haut, vous accorder santé, bonheur et longue vie et faire en sorte que jamais je ne vous déçoive.

A mes adorables sœurs : (Djahida ; Siham ; Ibtissam) Sans qui, la vie n'aurait aucun charme, vous me remplissez de joie et de bonheur.

A mes chères frères : (Yacine ; Khalifa).

À mes chers petits neveux: (Taki Eddine ;Imad Eddine ;Mohamed Hassan)

A Ma Binôme, ma belle« SARA ».

À MES AMIS DE TOUJOURS : Fatima ; Naima ;Sara ;Sabah ;hanen ;Ahlem ; En souvenir de notre sincère et profonde amitié et des moments agréables que nous avons passés ensemble.

Une Spéciale Dédicace à toi Mohamed.

A toutes les personnes qui m'ont encouragé à terminer ce modeste travail. Zaineb



Liste des Figures
Liste des Symbole
Liste des tableaux
Introduction générale1
Chapitre I: Généralité sur les systèmes photovoltaïques
12 Généralité
I.2.1.Energie Photovoltaïque
I.2.2. Principe de la conversion photovoltaïque
I.2.3. Les types de cellule solaire5
I.2.3.1.Cellule mono-cristallin
1222 Collula note anistallin 5
1.2.3.2.Cellule amorphe 6
I.2.3.2.Cellule amorphe 5 I.2.3.3.Cellule amorphe 6 I.3.Du silicium a la cellule photovoltaïque 7
1.2.3.2.Cettute poly-cristatith 5 I.2.3.3.Cellule amorphe 6 I.3.Du silicium a la cellule photovoltaïque 7 I.3.1.La silice: matière première d'une cellule photovoltaïque 7
1.2.3.2.Cettute poly-cristation 5 1.2.3.3.Cellule amorphe 6 1.3.Du silicium a la cellule photovoltaïque 7 1.3.1.La silice: matière première d'une cellule photovoltaïque 7 1.3.2.Extraction purification du silicium photovoltaïque 8
1.2.3.2.Cettute poly-cristatin 5 1.2.3.3.Cellule amorphe 6 1.3.Du silicium a la cellule photovoltaïque. 7 1.3.1.La silice: matière première d'une cellule photovoltaïque. 7 1.3.2.Extraction purification du silicium photovoltaïque. 8 1.3.2.1. La production du silicium métallurgique (MG-Si). 8
1.2.3.2.Cettute poly-cristation 5 1.2.3.3.Cellule amorphe 6 1.3.Du silicium a la cellule photovoltaïque 7 1.3.1.La silice: matière première d'une cellule photovoltaïque 7 1.3.2.Extraction purification du silicium photovoltaïque 8 1.3.2.1. La production du silicium métallurgique (MG-Si) 8 1.3.2.2.Purification du silicium métallurgique 8
1.2.3.2.Cetuute poly-cristatum 3 I.2.3.3.Cellule amorphe 6 I.3.Du silicium a la cellule photovoltaïque 7 I.3.1.La silice: matière première d'une cellule photovoltaïque 7 I.3.2.Extraction purification du silicium photovoltaïque 8 I.3.2.1. La production du silicium métallurgique (MG-Si) 8 I.3.2.2.Purification du silicium métallurgique 10
1.2.3.2.Cettute poly-cristatum 5 1.2.3.3.Cettute amorphe 6 1.3.Du silicium a la cettute photovoltaïque 7 1.3.Du silicie: matière première d'une cettute photovoltaïque 7 1.3.1.La silice: matière première d'une cettute photovoltaïque 7 1.3.2.Extraction purification du silicium photovoltaïque 8 1.3.2.1. La production du silicium métallurgique (MG-Si) 8 1.3.2.2.Purification du silicium métallurgique 10 1.3.3.Obtention des lingots de silicium 10
1.2.3.2.Cetute poly-cristation 3 I.2.3.3.Cellule amorphe 6 I.3.Du silicium a la cellule photovoltaïque 7 I.3.1.La silice: matière première d'une cellule photovoltaïque 7 I.3.2.Extraction purification du silicium photovoltaïque 8 I.3.2.1. La production du silicium métallurgique (MG-Si) 8 I.3.2.2.Purification du silicium métallurgique 10 I.3.3.Obtention des lingots de silicium 10 I.3.3.1Lingots monocristallins. 10
1.2.3.2.Cellule poly-cristatin 3 1.2.3.3.Cellule amorphe 6 1.3.Du silicium a la cellule photovoltaïque 7 1.3.La silice: matière première d'une cellule photovoltaïque 7 1.3.2.Extraction purification du silicium photovoltaïque 8 1.3.2.1. La production du silicium métallurgique (MG-Si) 8 1.3.2.2.Purification du silicium métallurgique 10 1.3.3.Obtention des lingots de silicium 10 1.3.3.1Lingots monocristallins. 10 a. La méthode de tirage de czochralski(cz) 10

1.3.3.2. Lingotsmulticristallins. 12	2
a. Procédé de solidification dirigée Bridgman	2
I.3.4.obtention des wafers photovoltaïque12	3
I.3.5.Dopage du silicium	4
I.3.5.1. Dopage de type N14	4
I.3.5.2. Dpage de type P13	5
I.4. Méthode industrielle de fabrication d'une cellule photovoltaïque1	5
I.5. Les pertes physiques et technologiques	7
I.5.1. Pertes par les photons de grande longueur d'onde12	7
I.5.2.Pertes dues à l'énergie excédentaire des photons12	7
1.5.3. Facteur de tension	7
I.5.4. Facteur de forme FF12	7
1.5.5.Réflectivité	8
I.4.6. Taux d'ombrage18	8
I.4.7.Rendement d'absorption18	8
I.4.8. Rendement de collecte18	8
I.5.conclusion	8
Chapitre II:La diffusion des dopants dans le silicium II.1.Introduction	1
II.2.Notions théoriques de la diffusion thermique dans le silicium	1
II.3.Les équations de la diffision	2
II.3.1. La première loi de Fick22	2
II.2.2. Flux Généralisés	2
II.2.3.Deuxiéme Loi de Fick	3
II.4.Résolution de l'équation de Fick2	3
II.4.1.Cas d'une source dopante infinie–pré-déposition des dopants	3
II.4.2.Cas d'une source dopante finie– Redistribution des dopants	4

II.5.Champ électrique induit	. 25
II.6.Mécanismes de diffusion à l'échelle atomique	. 26
II.6.1.Mécanisme interstitiel	. 26
II.6.1.Mécanisme substitutionnel	. 27
II.7.Procédé standard de fabrication des cellules photovoltaïques en silicium cristallin	. 27
II.7.1.Cellule photovoltaïque sur substrat de silicium de type p	. 27
• Réalisation de l'émetteur de phosphore par diffusion	28
II.7.2.Fabrication des cellules photovoltaïque sur substrat de silicium de type n	29
Réalisation de l'émetteur bore par diffusion pour la formation des émetteurs p ⁺	29
Les procédés de diffusion bore	29
II.8. Résolution numérique unidimensionnelles de système d'équation de diffusion	. 31
II.8.1. Méthode des différences finis	32
II.8.1.1. Discrétisation spatiale	. 32
II.8.1.2.Discrétisation temporelle	. 33
II.8.1.3. Schémas numériques pour la résolution de l'équation de la diffusion	. 34
II.8.2. Résolution approchée de l'équation de diffusion	. 34
II.9.conclusion	. 35
Chapitre III : Résultats et discussion	
III.1 Introduction	. 38

III.2.Coefficient de diffusion	<i>38</i>
III.3.Mécanisme de diffusion du bore	
III.4. Profil expérimentale de la diffusion bore	40
III.5.Simulation du profil de diffusion du bore dans le silicium	41
III.5.1.Influence de la température	42
III.5.2.Temps de diffusion	43
III.5.3.La concentration du bore	44

III.6.Optimisation de la cellule solaire de type N	
III.6.1.Effet de la couche anti reflet	
III.6.2.Effet de l'émetteur	
III.6.3.Effet de la base	
III.6.3.1.La durée de vie	
III.6.4.Effet de BSF	
III.7.Conclusion	

Liste des Figures

Titre

page

Chapitre I :

Figure (I.1) : Principe de la conversion photovoltaïque	4
Figure (I.2) : Les différents types des cellules photovoltaïques	6
Figure (I.3) : Etapes d'élaboration de cellules photovoltaïque	7
Figure (I.4) : Production du silicium métallurgique	8
Figure (I.5) : Réacteur Siemens	9
Figure (I.6) : technique de tirage Czochralski	11
Figure (I.7) : schéma de principe de la zone fondu	12
Figure (I.8) : Cristallisation d'un lingot multicristallin par solidification dirigées	12
Figure (I.9) : Obtention des wafers photovoltaïques	13
Figure (I.10) : Dopage type N	14
Figure (I.11) : Dopage type P.	15

Chapitre II :

Figure (II.1) : Diffusion interstitielle simple (en rouge impureté)	
Figure (II.2) : Mécanisme de diffusion substitutionnel	
Figure (II.3) : Production du silicium métallurgique	
Figure (II.4) : vue en coupe de la structure de base d'une cellule photovoltaïquesubstratsilicium de type n à émetteur borre	sur 29

Chapitre III

Figure (III.1) : coefficients de diffusion intrinsèque des principaux dopants utilisés en
micro-électronique
Figure (III.2) : Profil de diffusion expérimental du bore dans le silicium obtenu par SIMS.
Figure (III.3) : Profils de diffusion de Bore pour d ifférentes températures
Figure (III.4) : Variation des profils de diffusion bore da ns le silicium en fonction du temps de diffusion
Figure (III.5) : Profils de diffusion de bore pour les différentes dose
Figure (III.6) : Influence de l'épaisseur de la couche anti reflet sur le rendement 46

Figure (III.7) : L' influence de l'indice de réfraction sur le rendement	
Figure (III.8) : Influence de la profondeur de jonction sur le rendement	
Figure (III.9) : nfluence de la durée de vie sue le rendement	
Figure (III.10) : Effet de l'épaisseur BSF sur le rendement de la cellule	solaire 49

Listes des symboles

Symboles	Sens physique	Unité
λ : Longueur d'onde		<i>(m)</i>
T : température		(K)
K : Coefficient de Boltzr	nan 1.38.10 ⁻²³	(J/K)
q : Charge de l'électron		$(1.6.10^{-19}C)$
E _g : Energie de rupture	de bande du semi-conducteur	(eV)
V oc : Tension de circui	t ouvert	<i>(V)</i>
I ph : Photo courant		(A)
V : Tension de sortie de	module photovoltaïque	(V)
\pmb{R} : Le coefficient de réfl	exion	
${oldsymbol au}$:de la durée de vie		<i>(s)</i>
$ec{J}$: Le flux d'impuretés		$(cm^{-2}s^{-1})$
$oldsymbol{D}_{oldsymbol{A}}$: Coefficient de diffu	usion de l'impureté.	$(cm^2.s^{-1})$
C : La concentration		(atm / Cm^{3})
$\pmb{N_S}$: Concentration de l	'impureté.	$(atm / Cm^{3)}$
< v > : vitesse moyenn	е.	<i>m /s</i>

 C_s : Concentration superficiel

t : Temps

- **Q** : La quantité totale d'impuretés.
- $oldsymbol{Q}_T$: La quantité totale d'impuretés
- **h** : facteur d'accélération.
- **n**_i: concentration intrinsèque à la température de diffusion.
- **C** : concentration en impuretés ionisées.
- **erf** : fonction d'erreur.
- N_X/N_T : le nombre de nœuds.

Liste des tableaux

N º detableau	Titre	Page
<i>I.1</i>	Etapes de fabrication d'une cellule photovoltaïque par une méthode industrielle standard.	16
III.1	Paramétre de la structure simulée	45

Introduction générale

La production d'énergie est un défi de grande importance pour les années à venir, les besoins énergétique des sociétés industrialisées ne cessent d'augmenter. Par ailleurs, lespays en voie de développement auront besoin de plus en plus d'énergie pour mener à bien leurdéveloppement, une grande partie de la production d'énergiemondiale est assurée à partir desource fossile[1].

La consommation mondiale d'électricité observée durant ces dernières décennies estfortement liée au développement de l'industrie, du transport et des moyens decommunications. De nos jours, une grande partie de la production électrique est produite àpartir de ressources non renouvelables comme le charbon, le gaz naturel, le pétrole etl'uranium. Leur vitesse de régénération est extrêmement lente à l'échelle humaine. Ce quientrainera à courte échéance un risque non nul d'épuisement de ces ressources [2].

Le silicium est aujourd'hui le matériau le plus utilisé pour la fabrication de cellules solaires : il représente 90% de la production mondiale. Malgré le développement de la filière des couches minces, utilisant d'autres matériaux (CdTe, CIS...), le silicium devrait rester le matériau majoritairement utilisé pendant plusieurs années encore. La filière silicium bénéficie en effet d'une plus grande maturité que celle des couches minces. Le prix de la fabrication des plaques de silicium constitue cependant une part importante des coûts d'élaboration des cellules solaires [3].

Mais qui contiennent une concentration élevée d'impuretés et de défauts .Pour remédier à cela, une variété de procédés a été inventée au niveau des techniques de tirage du lingot de silicium multi cristallin.

Historiquement, la diffusion est l'une des premières techniques largement utilisées par l'industrie photovoltaïque pour l'élaboration des émetteurs électriques sur la surface d'une plaquette de silicium, que ce soit de structure n⁺p ou p⁺n. Le procédé est d'abord développé par la microélectronique pour la fabrication des composants tels que les transistors et les circuits intégrés, avant qu'il ne soit adapté à la formation des jonctions électriques destinées aux cellules solaires au silicium. Le principe consiste en la diffusion à haute température (800-900°C), des impuretés dopantes

d'atomes de bore B pour les structures p+n ou de phosphore P pour les structures n+p, dans un four à tube de quartz[4].

Ce qui est abordé dans ce travail selon les chapitres suivants :

- Dans le premier chapitre, nous avons présenté généralité sur les systèmesphotovoltaïques, puis il détaille les étapes nécessaires à l'élaboration de cellules photovoltaïques (les différents procédés de purification et de cristallisation du silicium.)
- Dans Ledeuxième chapitre nous apportons des notions sur la théorie de la diffusion thermique Nous définissons les équations régissant la diffusion. La compréhension des phénomènes de diffusion des dopants passe par le rappel des équations générales de Fick et surtout par une bonne connaissance des défauts ponctuels dans le silicium. Il est important tout de même, de signaler que les mécanismes de diffusion mettent en jeux les interactions du dopant avec les défauts ponctuels présents dans le silicium. Pour cela, nous avons rappelé les propriétés importantes de ces défauts.
- Dans le troisième chapitre, nous présentons d'une façon détaillée de diffusion de bore,. La simulation numérique de la diffusion du bore est d'une grande pertinence pour l'amélioration de la cellule solaire au silicium cristallin de type n.. Nous décrivons la structure de la cellule solaire type n à simuler et nous ferons une étude de simulation effectuée sous PC1D, PC2D, MATLAB et PVsysten exposant les résultats obtenus par simulation numérique, les résultats sont présentés et discutés.Nous terminerons ce travail par une conclusion générale.

✓ *Références Bibliographie de l'introduction générale*

- [1] F. Brihmat, «L'étude conceptuelle d'un système de conditionnement de puissance pour une centrale hybride PV/Eolien», Mémoire de magister, université Mouloud mammeri, Tizi-ouzou, (2012).
- [2] L.Saher, «Réserves pétrolières-le pessimisme de l'AID», EL Watan (2009).
- [3] J. Jäger- Waldau, « PV Status Report», European commission, (2008).
- [4] D,Bouhafs.« Contribution au développement de cellules solaires au silicium multicristallin par gettering au phosphore et atomisation d'émulsions dopantes»,Thèse de doctorat., Université M'hamedBougara. Faculté des Sciences de l'Ingénieur. ,Boumerdés,(2009).

Chapitre I

Généralité sur les systèmes photovoltaïques

I.1.Introduction

Les composants photovoltaïques sont en général fabriqués avec des matériaux semiconducteurs comme le silicium lesquels possèdent des propriétés optoélectroniques intrinsèques leurs permettant la conversion des photons absorbés en énergie électrique.

Ce phénomène est régi par l'interaction photon-matière et il dépend de plusieurs paramètres physiques liés à la nature du rayonnement et surtout aux propriétés intrinsèques du matériau récepteur [1].

Ce chapitre présente tout d'abord les principes physiques de base nécessaires à la conversion photovoltaïque de l'énergie. En porte ensuite sur e les différents procédés de purification et de cristallisation du silicium et le procédé de fabrication des cellules photovoltaïques sur silicium cristallin. Nous abordons les types et les propriétés du matériau de base qui est le silicium cristallin, ses caractéristiques ainsi que les pertes théoriques et technologiques de la cellule photovoltaïque.Une description de la méthode de fabrication de la cellule permettra de mettre en évidence l'outil majeur utilisé lors de ce travail.

I.2. Généralité

I.2.1. Energie Photovoltaïque

Le terme photovoltaïque souvent abrégé par le sigle « PV », a été formé à partir des mots « photo » un mot grec signifiant lumière et « Volta » le nom du physicien italien Alessandro Volta qui a inventé la pile électrochimique en 1800. L'effet photovoltaïque est la conversion directe de l'énergie solaire en électricité[2].

I.2.2. Principe de la conversion photovoltaïque

La cellule photovoltaïque est composée d'un matériau semi-conducteur qui absorbe l'énergie lumineuse et la transforme directement en courant électrique. Dans le cadre de ce travail, nous nous intéressons au silicium. Dans le silicium, l'énergie nécessaire pour transférer un électron de l'état lié (électron de valence) à l'état libre (électron de conduction) est égale à l'énergie de bande interdite $E_g=1.12eV$.Son principe de fonctionnement est basé sur trois mécanismes :

- L'absorption des photons par le matériau constituant la cellule.
- conversionde l'énergie du photon en énergie électrique, ce qui correspond à la création de paires électron/trou dans le matériau semi-conducteur.
- la collecte des porteurs générés dans un circuit électrique extérieur.

Le rôle de la cellule solaire est de limiter les recombinaisons (électron/trou) vers un circuit extérieur.Qui nécessite la présence d'un champ électrique est établi au sein du matériau, Cette tâche est assurée par la jonction PN entre un semi-conducteur de type n (riche en électrons libres) et un substrat semi-conducteur de type p (riches en trous libres)[3,4].



Figure.I.1. Principe de la conversion photovoltaïque [3].

Les paires électron-trou générés se comportent différemment suivant la région :

- Dans les zones électriquement neutres P et N, les photo-porteurs minoritaires diffusent. Ceux qui atteignent la région de charge d'espace(FigureI.1) sont propulsés par le champ électrique vers la région vers la zone P (pour les trous) etvers la zone N (pour les électrons) où ils deviennent majoritaires. Ces photo-porteurs contribuent donc au courant par leur diffusion ils créent un photo-courant de diffusion.
- Dans la zone de charge d'espace, les paires électrons trous créés par les photons sont dissociées par le champ électrique, l'électron est propulsé vers la région de type n et le trou vers la région de type P. Les porteurs donnent naissance à un photo-courant de génération.

Ces deux contributions ensemble ont pour résultat de donner une photo courant total I_{ph} , c'est un courant de porteurs minoritaires. Il est proportionnel à l'intensité lumineuse [5].

I.2.3. Les types de cellulesolaire

On utilise différents matériaux et structures pour améliorer les performances des cellules PV et augmenter le rendement. On distingue plusieurs types de cellules solaires selon leurs structures. Les cellules solaires à couche mince, les cellules solaires organiques et les cellules solaires au silicium.

Cependant, quel que soit leur type, leur rendement reste assez faible, de 8 à 23% de l'énergie qu'elles reçoivent Nous présenterons uniquement les cellules solaires au silicium, car étant les plus répanduesII existe trois catégories principales de photopile au silicium [6].

I.2.3.1. Cellules monocristallines

Le silicium mono cristallin n'est pas facile à obtenir. Il exige plusieurs étapes de purification car il nécessite un taux de pureté très élevé, ce qui rend ces étapes très couteuses .Le terme «cristallin » implique que tous les atomes dans le matériau PV actif font partie d'une structure cristalline simple où il n y a aucune perturbation dans les arrangements ordonnés des atomes [6].

> Avantages

- Très bon rendement (environ 150 WC/m²).

- Durée de vie importante (+/- 30 ans).

Inconvénients

- Coût élevé
- Rendement faible sous un faible éclairement.
- Rendement record en laboratoire : environ 25%.

I.2.3.2.Cellules poly-cristallines

Il est composé de petits grains de silicium cristallin.Le silicium multi cristallin est actuellement la technologie la plus utilisée car ellereprésenté 50 % du marché .Sa structure hétérogène est obtenue par coulage de cristaux de silicium [6].

> Avantages

- Bon rendement
- Durée de vie importante (+/- 30 ans)
- Meilleur marché que le monocristallin

> Inconvénients

- Rendement faible sous un faible éclairement.
- Rendement module commercial : 11 à 15%.
- Rendement record en laboratoire : environ 20%.

I.2.3.3.Cellules amorphes

Les cellules amorphes sont utilisées partout où une solutionéconomique est recherchée ou lorsque très peu d'électricité est nécessaire elles sont utilisées couramment dans de petits produits de consommation telle que des calculatrices solaires ou encore des montres Par contre, son rendement de conversion est entre 8 - 10 % (autour de 13 % en laboratoire pour une cellule non dégradée), mais ne nécessitent que de très faibles épaisseurs de silicium et ont un coût peu élevé [7,8].



Cellule amorphe



Cellule poly-cristalline.



Cellule monocristalline

Figure.I.2.Les différents types des cellules photovoltaïques [6].

I.3. Du Silicium à la cellule photovoltaïque

Le constituant essentiel d'une cellule photovoltaïque responsable de l'effet photovoltaïque est un semi-conducteur. Le semi-conducteur le plus utilisé aujourd'hui est le silicium. Nous évoquerons donc uniquement le silicium dans cette présentation, mais d'autres semi-conducteurs existent tel que le sélénium, le tellure de cadmium, etc. La fabrication des cellules photovoltaïques en 5 étapes[9]:

- > La silice: matière première d'une cellule photovoltaïque.
- > Extraction purification du silicium photovoltaïque.
- Obtention des lingots de silicium.
- > Obtention des wafers photovoltaïques.
- ➢ Le dopage .

I.3.1. Matière première d'une cellule photovoltaïque

Le silicium est le deuxième élément le plus abondant de la croute terrestre après l'oxygène (O). Dans le tableau périodique, il est situé dans la colonne IV, entre le carbone (C) et le germanium (Ge) et la troisième ligne, entre l'aluminium (Al) et le phosphore (P), il dispose de 4 électrons de valence. Il s'agit d'un semi-conducteur avec un gap indirect de 1.12 eV [10].

Il est présent sous différentes formes, parmi elles le quartz (Si oxydé ou silice)résume les principales étapes de la chaine de fabrication d'une cellule PV à base de silicium, depuis le minerai originel de quartz [11].



Figure I.3. Etapes d'élaboration de cellules photovoltaïque [11].

I.3.2. Extraction purification du silicium photovoltaïque

I.3.2.1.La production du silicium métallurgique (MG-Si)

Le silicium métallurgique (MG-Si) (en anglais MetallurgicalGrad: MG-Si) est obtenu par réduction carbochimique (la réduction de la silice avec le carbone (C) dans un four à arc électrique) (Figure(I.4). Les creusets des fours sont remplis avec du quartz et des matériaux carbonés puis sont portés à très haute température environ 1800°C. La réaction globale de réduction s'écrit [12]:

$$SiO_2(s) + 2C(s) \rightarrow Si(l) + 2CO(g)(I.1)$$

Figure.I.4. Production du silicium métallurgique [12].

Le silicium en fusion est alors déversé dans des poches puis séparé du laitier avant d'être coulé dans des lingotières. Le silicium ainsi obtenu présentera une pureté typique de 98.5 % et les impuretés présentes proviennent soit des intermédiaires de réaction, soit des impuretés contenues dans la matière première (métalliques, carbone, bore et phosphore) [11].

I.3.2.2. Purification du silicium métallurgique

La pureté du silicium obtenu par ce procédé est comprise entre 98% et 99,5%. il faut encore le purifier pour obtenir un matériau de qualité électronique.

La purification du silicium (MG-Si) en silicium (EG-Si) s'effectue par voie gazeuse en utilisant des gaz chlorés. Différents procédés existent comme le procédé « Union Car bide » ou le procédé « Ethyle Corporation », le plus connu étant le procédé « Siemens ».

Actuellement, la voie chimique occupe la quasi-totalité du marché avec deux procédés majoritaires à partir de trichlorosilane (75%) et de mono silane (25%).

L'hydro-chloration du MG-Si catalysée par le cuivre dans un réacteur à lit fluidisé, pour obtenir le trichlorosilane (SiHCl₃) suivant la réaction:

 $Si(s) + 3HCl \rightarrow SiHcl_3 + H_2(g)$ (I.2)

Cette réaction réduit les concentrations du bore (B) et du phosphore(P) à quelques ppm-a (partie par milliard atomique).

Le trichlorosilane vaporisé et injecté avec l'hydrogène (H_2) dans le réacteur « Siemens », se décompose sur la surface de filaments chauffés à 1100 °C (Figure III-3) suivant la réaction [12]:

 $SiHCl_3(g) + H_2(g) \rightarrow Si(s) + 3HCL$ (I.3)



Figure .I.5 .RéacteurSiemens[11].

Après la distillation, la teneur est en très haute pureté, le silicium est alors de qualité électronique. Le silicium pur obtenu (donc intrinsèque) doit maintenant subir un double traitement à la fois d'enrichissement en matériau dopant afin d'en faire du silicium extrinsèque de type p ou n comportant une proportion d'une impureté connue et d'obtenir de plus un

monocristal convenablement orienté. Le silicium électronique obtenu est ensuite cristallisé en lingots[13].

I.3.2.3. Silicium solaire

Les applications photovoltaïques ne nécessitent pas un degré de purification élevé, d'autres procédés moins énergivores que celui de « Siemens » sont utilisés pour produire du silicium de grade solaire. Une de ces techniques est celui de « réacteur fluidisé», la production étant plus rapide et la consommation d'énergie est moins de 70% par rapport à celle de la procédé "Siemens" Néanmoins, le traitement est difficile et nécessite de grandes compétences.

Dans ce procédé, le (MG-Si) est directement purifié en silicium métallurgique amélioré. Il existe plusieurs versions de ce procédé comme celui de la société « 6N-Silicone » qui consiste à fondre le (MG-Si) dans l'aluminium (Al) liquide à 800 °C au lieu de 1414 °C, ensuite, on laisse la masse fondue se refroidir pour former des cristaux de silicium [14].

I.3.3. Obtention des lingots de silicium

Après avoir vu les méthodes qui permettent d'obtenir le silicium qui va servir de matière première aux cellules photovoltaïques, nous allons nous intéresser aux différentes techniques permettant d'élaborer les lingots de silicium qui serviront ensuite à la fabrication des panneaux solaires. Les lingots de silicium élaborés pour ces applications peuvent être monocristallins ou multi-cristallins[15].

I.3.3.1.Lingots monocristallins

Plusieurs techniques sont utilisées pour cristalliser le silicium purifié, les plus connues sont, le procédé « Czochralski » (Cz) et le procédé Fusion de Zone « Float Zone » (FZ) qui produisent du silicium monocristallin.

a. La méthode de tirage Czochralski (Cz)

Cette méthode qui a été inventée par Jan Czochralski (1916), consiste à fondre le silicium poly cristallin dans un creuset en quartz à 1450 °C, des dopants (bore et phosphore) peuvent alors être ajoutés pour doper le silicium de type p ou de type n. Un germe de silicium monocristallin avec une orientation cristallographique précise est placé en contact avec la surface du bain en fusion.

Le silicium solidifié et tiré lentement vers le haut, prend l'orientation cristallographique du germe. (Figure I.5). Ensuite la vitesse de tirage est augmentée jusqu'à atteindre la vitesse spécifique à laquelle le cristal croît avec le diamètre désiré. Le lingot obtenu peut atteindre 30 cm de diamètre et 2 m de longueur. Pour le photovoltaïque, les diamètres finaux des cellules actuelles, obtenues à partir des lingots, se situent généralement entre 12.5 et 15.6 cm [15].



Figure.I.6. Technique de tirage Czochralski [15].

b. Procédé fusion de zone

La méthode de fusion de zone ou aussi appelée zone flottante est utilisée pour élaborer des lingots de silicium de très haute résistivité en utilisant le principe de ségrégation des impuretés au cours de la solidification en fonction de leur coefficient de partage. La fusion/solidification est réalisée par le mouvement d'une bobine le long de l'échantillon de bas en haut (Figure.I.7).

L'avantage majeur de cette technique ne requiert pas l'utilisation d'un creuset car le liquide est maintenu par la tension de surface et par le champ magnétique.Cette méthode présente un inconvénient majeur de par la limitation du diamètre des échantillons [16,17].



Figure.I.7. schéma de principe de la zone fondu[17].

I.3.3.2.Lingots multi cristallins

a. Procédé de solidification dirigée Bridgman

La méthode de solidification dirigée consiste à faire fondre une charge de silicium préalablement purifié dans un creuset en silice. Ce dernier est recouvert d'une couche antiadhérente de nitrure de silicium (Si₃N₄) séparant et limitant toute réaction entre le silicium liquide et la silice solide. La température du bain de silicium est homogénéisée, puis le creuset est progressivement refroidi du bas vers le haut. Un gradient de température se forme et un front de solidification se crée. Des grains de tailles et d'orientations différentes avec une croissance colonnaire se développent et forment un silicium dit « multi cristallin » (Figure I.8)[12].



Figure.I.8. Cristallisation d'un lingot multi cristallin par solidification dirigées[12].

I.3.4. Obtention des wafers photovoltaïques

Les lingots monocristallins ou les briques multi cristallines sont finalement découpés en plaquettes à l'épaisseur souhaitée (en général entre 150 et 300 μ m). Dans le procédé standard où l'abrasion est réalisée par des particules de Sic, cette étape est couramment effectuée à l'aide d'une scie à fil d'acier lubrifié qui, par un jeu de rouleaux, permet la découpe de la totalité du lingot/de la brique en une opération (voir Figure 10).

L'épaisseur du fil étant de 120 à 140 μ m, cette étape conduit à une perte massive de matière. Seuls 60% de la masse du lingot sont transformés en plaquette, le reste étant sous la forme de fines particules de silicium mélangées au lubrifiant, et donc difficilement récupérables [18].



Figure.I.9. Obtention des wafers photovoltaïques [9].

I.3.5. Dopage du silicium

Les wafers de silicium obtenus à l'issue de l'étape de sciage sont alors introduits dans un réacteur de croissance dans lequel va se dérouler l'étape de dopage.

On peut modifier de façon considérable la concentration de porteurs de charge d'un semi-conducteur intrinsèque en lui ajoutant de faibles quantités d'atomes astucieusement choisis et que l'on appelle impuretés dopantes ou tout simplement dopants. On obtient alors un semi-conducteur extrinsèque ou dopé. Selon la nature des atomes introduits, soit le nombre d'électrons devient très supérieur au nombre de trous et le semi-conducteur est appelé de type n, soit le nombre de trous devient très supérieur à celui des électrons et le semi-conducteur est appelé de type p [18].

Il existe deux types de dopage : le type N (Négatif) et le type P (Positif).

I.3.5. 1.Dopage de type N

Le dopage de type N consiste à ajouter un atome de phosphore au sein de la structure cristalline du silicium. Le phosphore disposant de 5 électrons sur sa couche électronique externe va s'associer avec 4 atomes de silicium, laissant ainsi libre un électron. Cet ajout a pour effet de donner à la structure cristalline une charge globale négative [9].



Figure.I.10.Dopage type N[9].

I.3.5. 2.Dopage de type P

Le dopage de type P consiste à ajouter un atome de bore au sein de la structure cristalline du silicium. Le bore disposant de 3 électrons sur sa couche électronique externe va s'associer avec 4 atomes de silicium, laissant ainsi libre un trou. Cet ajout a pour effet de donner à la structure cristalline une charge globale positive [9].



Figure.I.11. Dopage type P[9].

I.4. Méthode industrielle de fabrication d'une cellule photovoltaïque

Les matières premières utilisées sont des wafers de silicium mono- ou multi cristallins, des plaques rondes, carrées ou « pseudo-carrées » d'une épaisseur variant de 180 à 300 µm. Ces wafers subissent différentes étapes de fabrication afin d'obtenir la structure de la cellule solaire. Le Tableau I.1 présente ces étapes dans le cas de la fabrication d'une cellule solaire industrielle conventionnelle. Dans le cadre de cette travail, nous allons nous intéresser plus particulièrement à l'étape de diffusion liée à la formation de l'émetteur (étape 2)[19].

Traitement de surface et Texturation
- Décapage à la soude.
- Texturation acide ou basique.
Formation de la Jonction N
- Diffusion phosphore (POCl ₃ /800°)
- Formation d'une structure n ⁺ p n ⁺
 Ouverture de la jonction
- Elimination de la jonction parasite en
bordure.
- Gravure plasma latérale (CF ₄ +O ₂).
Dépôt de la couche antireflet
- Dèpot PECVD de S _i N _x :H
- Passivation de la surface avant.
Métallisation de la face avant
- Sérigraphie Ag grille face avan.t
 Métallisation face arrière et cofiring
 - Four à passage (800°/30s)
- Formation de BSF face arrière
- Sérigraphie Al pleine plaque face
arrière
- Passivation en volume
(hydrogénation a partie du S _i N _x :H)

 Tableau .I.1. Etapes de fabrication d'une cellule photovoltaïque par une méthode industrielle standard [19].

I.5.Les pertes physiques et technologiques

Les différents facteurs de pertes sont dus soit aux restrictions purement physiques liées au matériau, soit aux limitations technologiques induites par le processus de fabrication.Le rendement de cellule photovoltaïque peut être exprimé en prenant en compte les facteurs de pertes [19].

I.5.1. Pertes par les photons de grande longueur d'onde

Tous les photons possédant une longueur d'onde supérieure à celle associée au gap du semi-conducteur ($\lambda > \lambda_g$) ne peuvent générer de pair électron/trou et sont donc perdus. Les mécanismes d'absorption assistée par phonons permettent néanmoins de repousser la limite inférieure de l'énergie correspondant au gap du matériau (1.052 eV au lieu de 1.124 eV dans le cas d'une absorption assistée par un phonon dans le silicium). Sous un éclairement d'AM1.5, ces pertes sont évaluées à 23.5% dans le cas du silicium[19].

I.5.2. Pertes dues à l'énergie excédentaire des photons

Un photon absorbé génère seulement une paire électron/trou. L'excès d'énergie, supérieur à la largeur de la bande interdite, est principalement dissipé sous forme de chaleur. Sous un éclairement d'AM1.5, ces pertes sont évaluées à 33% de la puissance totale dans le cas du silicium [19].

I.5.3.Facteur de tension

C'est le rapport de la tension maximale développée par la cellule (V_{oc}) par la tension de gap Eg/q. La tension aux bornes d'une cellule n'est qu'une fraction de la tension de gap à cause notamment de la chute de potentiel au niveau des contacts et de la jonction. Les meilleures valeurs obtenues de V_{oc} sont de l'ordre de 700 *mV*, donnant, pour ces cellules à haut rendement, un facteur de tension de seulement 0.65 [19].

I.5.4. Facteur de forme FF

Les équations courant-tension sont régies par les équations de Boltzmann sous forme exponentielle. La courbe I(V) ne peut donc avoir une forme rectangulaire et, même dans le cas d'une cellule idéale, le facteur de forme ne peut dépasser 0.89. Ce terme dépend également fortement des paramètres technologiques modélisés par les résistances série et parallèle [19].
I.5.5. Réflectivité

Une partie de l'énergie incidente est réfléchie par la surface (non métallique) de la cellule. Le coefficient de réflexion R peut être optimisé par la mise en œuvre de traitements de surface adéquats et de couche antireflet.

I.5.6. Taux d'ombrage

Les contacts métalliques présents sur la face avant afin de collecter les porteurs entraînent des pertes de puissance puisqu'ils couvrent en partie la surface S de la cellule. Le taux d'ombrage est un compromis entre les pertes dues à la couverture partielle de l'émetteur par les contacts et les pertes de facteur de forme provoquées par la résistance série , liée à la largeur de la métallisation.

I.5.7. Rendement d'absorption

A cause de l'épaisseur limitée de la cellule, une partie non négligeable de photons, 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 très fines.

I.5.8.Rendement de collecte

C'est le rapport entre le nombre de porteurs effectivement collectés et le nombre total de porteurs photo générés. En effet, certains porteurs se recombinent dans le volume ou à la surface de la cellule, ce phénomène dépendant directement de la durée de vie τ des porteurs minoritaires. Ces recombinaisons peuvent êtreréduites en mettant en œuvre différents traitements, abordés plus loin dans ce rapport [19].

I.6.Conclusion

Ce chapitre a donc permis de donner au lecteur les notions de base permettant la compréhension du sujet de mémoire. Nous avons mis en évidence le principe de fonctionnement ainsi que les pertes théoriques et technologiques de la cellule photovoltaïque.

La description du procédé de fabrication industrielle d'une cellule solaire a permis d'introduire les deux étapes qui nécessite une diffusion thermique, la formation de l'émetteur, fortement dopés n+ et p+ respectivement.

I.7. Références bibliographiques

- [1] D.Bouhafs, « Contribution au développement de cellules solaires au silicium multi cristallin par gettering au phosphore et atomisation d'émulsions dopantes», Thèse de doctorat, Université M'hamedBougara, Boumerdés, Alger, (2009).
- [2] S. BelaidLalouni, « Cours Energie Solaire Photovoltaïque», Bejaia, Alger (2015).
- [3] Y.Marouf, «Etude et simulation des cellules solaires multi-jonctions à base de matériaux semi-conducteurs III-V», Thèse de doctorat, Alger, (2019).
- [4] J.Veirman, « Effets de la compensation du dopage sur les propriétés électriques du silicium et sur les performances photovoltaïques des cellules à base de silicium solaire purifié par voie métallurgique», Thèse de doctorat, Lyon, INSA ,(2011).
- [5] *H*. *Mathieu*, "Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques", *Masson*, (1987).
- [6] <u>https://www.ecosources.info/dossiers/Types_de_cellules_photovoltaiques.</u>
- [7] B, Arbouz et A, Benhamada, « Conception et réalisation d'un dispositif mobile de l'énergie solaire photovoltaïque», Mémoire master, Université Djilali Bounaama ,Khemis Miliana, Alger.(2019).
- [8] B.Louzanza, S.Madi, D.Rekioua, «Etude et caractérisation d'un panneau photovoltaïque type Condor», Thèse doctorat ,Université Abderrahmane Mira, Bejaia, (2015).
- [9] http://www.hallou-solaire.com/usermedia/document-634234564258437500-2.pdf.
- [10] J. Degoulange, « Purification et caractérisations physico-chimiques et électriques de silicium d'origine métallurgique destiné à la conversion photovoltaïque», Thèse Doctorat, Grenoble, (2008).
- [11] A.Fauveau, «Etude des mécanismes de conduction électrique à basse température pour la mesure des teneurs en dopants dans le silicium photovoltaïque», Thèse de doctorat, Université Grenoble Alpes, France, (2017).
- [12] A. Mekemeche, « Modélisation à deux dimensions des propriétés physiques de cellules solaires au silicium à base de substrat de type n. Étude de quelques cas particuliers de cellules innovantes», Thèse de doctorat, Université Abdel Hamid Ibn Badis, Mostaganem, Alger,(2017).
- [13] A.Benmeddour, «Etude et simulations numériques des contraintes thermomécaniques dans le silicium photovoltaïque», Thèse de doctorat, Université Mentouri Canstantine, Alger, (2010).
- [14] E.A. Alsema, M.J. Wild-Scholten, V.M. Fthenakis, « Environ mental Impacts Of PV Electricity Generation A Critical Comparison Of Energy Supply Options». The 21st European Photovoltaic Solar Energy Conference,(2006).
- [15] T.Schutz-kuchly, « Investigation du silicium de qualité solaire de type n pour la fabrication de cellules photovoltaïques», Thèse de doctorat, Université d'Aix-Marseille, (2011).

A. Tanoudji, «Solidification dirigée du silicium multi-cristallin pour les applications photovoltaïques: caractérisation in situ et en temps réel par imagerie X synchrotron», Thèse de doctorat, Aix-Marseille, (2013).

[17] F.Jay, « Nouveaux substrats de silicium cristallin destinés aux cellules photovoltaïque à haut rendement: cas du silicium mono-like et du dopage aux donneurs thermiques liés à l'oxygène pour les cellules à hétérojonction de silicium», Thèse de doctorat, Université Grenoble Alpes ,(2016).

- [18] O.Bonnaud, «Cour Physique des Solides, des Semi-conducteurs et Dispositifs», (2010).
- [19] H.Lachachi, «Etude de la diffusion du bore et de la passivation des défauts dans les cellules solaires au silicium type N à haut rendement », Thèse de doctorat, Université Tlemcen, Alger 2018.

Chapitre II

la diffusion des dopants dans le silicium

II.1. Introduction

Le dopage dans les semi-conducteurs est possible grâce à l'introduction d'atomes (impuretés) dans le cristal, possédant une valence différente de celle des éléments composant le semiconducteur. Le dopage permet alors de contrôler la concentration de charges et donc la conductivité du semi-conducteur. Cette étape très importante dans la fabrication des cellules photovoltaïques utilise principalement deux procédés de dopage, implantation ionique et la diffusion thermique.

Les émetteurs des cellules photovoltaïques en silicium sont majoritairement fabriqués par le procédé de diffusion thermique qui est moins cher par rapport à l'implantation ionique. La diffusion, plus simple à mettre en œuvre, a la possibilité de traiter une grande quantité de plaques simultanément avec un coût abordable pour la production de cellules à l'échelle industrielle. L'implantation ionique, longtemps étudiée comme solution alternative à la diffusion, permet de contrôler avec précision la quantité de dopants mais reste onéreuse à l'échelle industrielle.

Dans ce chapitre, nous détaillerons les principales équations régissant la théorie de diffusion et nous présenterons les différents mécanismes.

II.2.Notions théoriques de la diffusion thermique dans le silicium

Le phénomène de diffusion thermique est très courant dans la nature. Il correspond à une tendance d'étalement d'espèces, de particules, d'atomes ou de molécules grâce à une excitation énergétique apportée par la chaleur. Suivant le milieu dans lequel se déplacent ces espèces, l'étalement sera plus ou moins grand. A température ambiante, le phénomène de diffusion sera très important dans un milieu gazeux, plus faible dans un milieu liquide et quasi-nul dans un milieu solide. Pour obtenir un phénomène de diffusion dans un solide ou un cristal, le matériau doit être chauffé à des températures parfois supérieures à 1000°C.

La diffusion constitue la méthode traditionnelle avec laquelle les dopants sont introduits dans un substrat pour changer la résistivité d'une couche ou former des jonctions. La compréhension des concepts théoriques, permettant de décrire le transport des dopants et des impuretés au cours des étapes de transformation à hautes températures, est importante puisque. Parallèlement, la réalisation d'une couche diffusée dépend de nombreux paramètresqui vont apporter leur contribution au produit final. Les phénomènes de diffusion nécessitent la prise en compte des différentes modifications physico-chimiques intervenant sur le substrat. Nous limiterons notre étude aux phénomènes de diffusion dans les solides et plus particulièrement dans les semi-conducteurs comme le silicium[1].

II.3. Les équations de la diffusion

Dans le cas le plus simple, on suppose que l'espèce diffusante n'est soumise qu'au gradient de concentration. Il est possible de montrer par la thermodynamique des processus irréversibles que la force motrice est proportionnelle au gradient de l'entropie partielle de mélange. Une série de calculs mène à l'équation traduisant

II.3.1.La première loi de Fick

Le flux d'impuretés \vec{J} est proportionnel au gradient de concentration en impuretés :

$$\vec{J} = -D_A \cdot \vec{\nabla}(\mathcal{C})(\text{II.1})$$

Le flux étant généralement exprime en atomes par centimètre carré et par seconde $(cm^{-2}s^{-1})$ et les concentrations en nombre d'atomes par centimètre cube, D_A s'exprimealors en $cm^2.s^{-1}$.Le signe moins de l'équation précédente traduit simplement le fait que la diffusion a lieu des zones à fortes concentrations vers les zones à faibles concentrations.

Dans le cas général (matériau non isotrope ou subissant une déformation), le flux est une grandeur vectorielle ; le coefficient de diffusion est donc un tenseur. Le silicium est un matériau isotrope (structure cristalline cubique) et s'il n'est pas soumis à des contraintes, il est possible de simplifier la première loi de Fick en une équation à une dimension, le coefficient de diffusion devenant alors un scalaire[2]:

$$J = -D_A \cdot \frac{\partial C}{\partial x} (\text{II.2})$$

II.3.2. Flux Généralisés

En fait l'écoulement de particules dans une direction donnée peut avoir deux origines, l'unest bien le gradient de concentration, mais l'autre est l'action d'une force extérieure, ou force de transport, sous l'effet de laquelle les particules se déplacent avec une certaine vitesse moyenne < v > C donnant ainsi naissance à un fluxd'où l'expression générale.

$$J = -D_A \cdot \frac{\partial C}{\partial x} + < v > C \qquad (\text{II.3})$$

II.3.3. Deuxième Loi de Fick

Cette loi permet de décrire l'évolution temporelle de la concentration en impuretés dans le matériau. Si l'on suppose que le système est conservatif, c'est-à-dire qu'il n'y a ni perte ni formation d'atomes de l'impureté diffusante, on peut alors établir le bilan de matière suivant :

$$\frac{\partial J}{\partial x} = -\frac{\partial C}{\partial t}(\text{II.4})$$

D'où, d'après la première loi de Fick :

 $\frac{\partial c}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} \left(-D \frac{\partial c}{\partial x} \right) = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} (\text{II.5})$

Le modèle de diffusion des dopants :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial F}{\partial x} = D_{ie} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1+\beta f}{1+\beta} \left(\nabla C_e + Z_e C_e \frac{\sum_j Z_j \nabla C_j}{\left(\sum_j (Z_j C_j)^2 + 4n_i^2\right)^{1/2}} \right) \right)$$

II.4. Résolution de l'équation de Fick

A partir des lois de Fick, il est possible de connaître la variation de la concentration en impuretés en fonction du temps et de l'espace. Il existe plusieurs résolutions mathématiques des équations de Fick. Pour trouver la solution, il faut déterminer une condition initiale et deux conditions aux limites. En général la résolution de ces équations n'est pas possible analytiquement, ce qui implique la nécessité d'avoir recours à des résolutions numériques[3].

II.4.1. Cas d'une source dopante infinie – Pré-déposition des dopants

La source en impuretés étant infinie, la concentration d'impuretés Ns est constante à la surface du substrat du silicium. On considère alors la concentration d'impuretés à la surface du matériau comme constante, il faut résoudre la deuxième équation de Fick à partir des conditions aux limites [4].

> 1^{er} Condition

La concentration d'impureté en surface est constante, elle égale à Cs. On néglige le régime transitoire :

C(0,t)=Cs(II.6)

➢ 2^{eme} Condition

La concentration à grande distance est nulle pendant toute la diffusion

 $\mathcal{C}(\infty, t) = 0(\text{II.7})$

On considère qu'à l'instant initial, la concentration dans tout le matériau est nulle

$$C(x,0) = 0(\mathrm{II.8})$$

La solution de diffusion est de la forme:

$$C(x,t) = C_s erfc\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$$
(II.9)

Avec: $2\sqrt{Dt}$ la profondeur de diffusion.

II.4.2.Cas d'une source dopante finie – Redistribution des dopants

Ce mode de diffusion est basé sur un modèle mathématique utilisant une quantité d'impuretés comme conditions limites sur la surface du substrat. La quantité totale d'impuretés Q est constante tout au long de la diffusion, elle peut s'écrire :

$$Q(t) = \int_0^\infty C(x) dx \tag{II.10}$$

Cette quantité Q correspond à celle qu'on a préalablement déposée à partir d'une source infinie pendant un temps t.

L'intégrale (II.10) permet donc de déduire la quantité Q_T de dopants introduite:

$$Q_T(t) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} C(0, t) \sqrt{Dt_p}$$
(II.11)

On peut alors résoudre la deuxième loi de Fick en prenant en considération les conditions initiales et au limites afin d'obtenir le profil de dopage durant l'étape de redistribution.

> 1^{er} Condition

Le gradient de concentration est nul en surface

$$\frac{\partial C(0.t)}{\partial x} = 0(II.12)$$

➢ 2^{eme} Condition

La concentration à grande distance est nulle pendant toute la diffusion

$$\mathcal{C}(\infty, t) = 0(\text{II.13})$$

Le profil de concentration initial est égale à :

$$C(x,t) = -erfc\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$$
(II.14)

Solution

$$C(x,t) = \frac{Q_T}{\sqrt{\pi Dt}} exp\left(\frac{x^2}{4Dt}\right) (\text{II}.15)$$

II.5.Champ électrique induit

Lors de l'introduction de dopants dans le silicium, les atomes dopants sont ionisés. Il faut donc considérer le déplacement simultané de donneurs (ou accepteurs) ionisés et d'électrons (ou de trous) lors de la diffusion thermique. Les deux espèces chargées n'ont pas la même mobilité. Pour rétablir l'équilibre, un champ interne est créé, permettant le déplacement des espèces les plus lentes et ralentissant celui des espèces les plus rapides. Le flux d'impuretés est donc modifié et apparaît sous la forme [5].

$$J = -D\left[1 + \frac{1}{\sqrt{1 + 4(\frac{n_i}{c})^2}}\right]\frac{\delta C}{\delta x} = -D_{eff}\frac{\delta C}{\delta x}(\text{II.16})$$

Où ni (cm^{-3}) est la concentration intrinsèque à la température de diffusion et c (cm^{-3}) la concentration en impuretés ionisées. On appelle h, facteur d'accélération dû au champ électrique:

$$h = 1 + \frac{1}{\sqrt{1 + 4(\frac{n_i}{c})^2}}$$
(II.17)

Il prend en compte l'effet dû au champ électrique interne. Ce coefficient effectif varie en fonction de la concentration en ions, et donc en fonction de la concentration en impuretés dopantes

II.6.Mécanismes de diffusion à l'échelle atomique

Les phénomènes de diffusion des impuretés peuvent être appréhendés en observant le comportement de celles-ci à l'échelle microscopique. Selon la nature de l'impureté, il existe différents mécanismes de diffusion. Dans tous les cas, l'impureté va effectuer une série de sauts d'un site à l'autre.

II.6.1.Mécanisme interstitiel

Dans ce cas, l'impureté saute de proche en proche, de site interstitiel en site interstitiel (figure II.1). L'impureté parcourt alors des distances importantes, ce qui se traduit par des coefficients de diffusion très élevés. Notons dans ce cas que des interactions peuvent apparaître entre les espèces diffusantes et d'autres impuretés. Ces interactions entraînent la formation de complexes, qui vont ralentir la diffusion de l'interstitiel et donc diminuer le coefficient de diffusion[6].



Figure II.1. Diffusion interstitielle simple (en rouge impureté) [6].

II.6.2.Mécanisme substitutionnel

Dans ce cas, la diffusion des impuretés n'est possible qu'en mettant en jeu les défauts ponctuels structuraux du silicium. Les impuretés occupant des sites du réseau cristallin (FigureII-2) sont appelés des défauts Substitutionnels. Elles mettent en jeu deux types de mécanismes de diffusion :



a-Mécanisme lacunaire

b-Mécanisme Auto interstitiel

Figure II-2 Mécanisme de diffusion substitutionnel [6].

II.7. Procédé standard de fabrication des cellules photovoltaïques en silicium cristallin

II.7.1.Cellule photovoltaïque sur substrat desilicium de type p

La figure II.3 présente la structure d'une cellule standard sur substrat de silicium de typep. Les différents éléments composant la structure sont :

- La base qui est le substrat de type p (dopé au bore).
- L'émetteur dopé n^+ (au phosphore) permettant de former la jonction p-n avec la base.
- Le Back Surface Field : BSF (ou champ répulsif en face arrière) dopé p+ (à l'aluminium).
- La couche antireflet en face avant : CAR (en nitrure de silicium S_iN).

- Les contacts en face avant et en face arrière pour permettre la collecte des porteurs de charge et la mise en module.



Figure II.3. Schéma de structure de cellule PV sur le silicium de type p[7].

• Réalisation de l'émetteurde phosphore par diffusion

L'émetteur est réalisé par diffusion de phosphore en phase gazeuse. Cette étape permet de réaliser la jonction p-n du dispositif.

La diffusion du phosphore se décompose en deux étapes : le « deposit » et le « drive-in ». La première étape est la formation du PSG (Phosphorous Surface Glass) en surface dusilicium qui est un oxyde fortement dopé au phosphore réalisé à faible pression à destempératures comprises entre 800 et 900 °C. Le gaz porteur N2 après bullage dans une sourceliquide de POCl₃ est injecté dans le four de diffusion avec un flux d'O₂.

- Réaction chimique du deposit :

 $4\text{POCl}_3 + 3\text{O}_2 \rightarrow 2\text{P}_2\text{O}_5 + 6\text{C}_{\text{L2}}(\text{II}.18)$

L'étape de drive-in permet la diffusion du phosphore de l'oxyde vers le substrat de Silicium. Cette étape est réalisée sous flux de N₂.

- Réaction chimique du drive-in :

 $2P_2O_5 + 5Si \rightarrow 4P + 5SiO_2(II.19)$

- Les émetteurs réalisés ont typiquement une profondeur de jonction de 0.4μm.
- La concentration en surface doit être suffisante de manière à permettre le contact métal-semi-conducteur (> 2.1020 cm⁻³).

II.7.2.Fabrication des cellules photovoltaïques sur substrat de silicium de type n

Avec la technologie homojonction, les deux principaux types d'architecture sur substrat de silicium de type n sont :

- la structure à émetteur inversé.
- la structure à émetteur bore.

Cette partie traite uniquement de la structure à émetteur bore. L'architecture de cette structure reprend celle de la cellule standard sur silicium de type p avec un émetteur en face avant et un BSF en face arrière (figure n°). Ici l'émetteur est formé par un surdopage p^+ au bore en face avant et le BSF est formé par sur dopage n⁺au phosphore en face arrière.

L'avantage de cette structure par rapport à la structure à émetteur inversé réside dans le fait qu'elle est mieux adaptée aux substrats de mauvaise qualité, donc à des substrats mc-Si purifiés par voie métallurgique tout particulièrement[7].



Figure II.4 vue en coupe de la structure de base d'une cellule photovoltaïque sur substrat de silicium de type n à émetteur bore[7].

Réalisation de l'émetteur borepar diffusion pour La formation des émetteurs p+

• Les procédés de diffusion Bour

Dans le processus de dopage par diffusion, il est nécessaire d'utiliser un four généralement composé par un ou plusieurs tubes en quartz permettant le dopage simultané de plusieurs plaques de silicium. Dans la technologie des cellules solaires photovoltaïques, la température de diffusion varie entre 800°C et 1200°C. Les procédés de diffusion vont

dépendre de la nature des sources de dopants. Il existe trois grands types de sources : gazeuses, liquides ou solides. Le bore possède une très forte solubilité dans le silicium et sa concentration active en surface peut aller jusqu'à 4 e20 cm⁻³ [8]

La réaction de diffusion en surface du substrat permettant la formation de la jonction est formée entre le trioxyde de Bore (B_2O_3) et le silicium (Si) suivant la réaction chimique :

$$2B_2O_3 + 3Si \longrightarrow 4B + 3SiO_2 \tag{II.20}$$

les principales méthodes pour la fabrication des émetteurs dopés bore par diffusion ainsi que leurs réactions chimiques.

> A partir de sources liquides

Les dopants liquides sont liquides à température ambiante mais facilement vaporisées. Un gaz porteur passe à travers du conteneur de la source liquide (appelé bulleur), et vient se charger en vapeurs de la source dopante qui sont alors diffusées à l'intérieur du tube. L'injection complémentaire d'oxygène et d'azote permettent de réaliser la réaction. Parmi les sources liquides, le tribromure de bore (BBr3) est l'une des plus courantes actuellement sur le marché [9].

La formation du trioxyde de Bore à partir de cette source se traduit par la réaction chimique suivante :

$$4BBr_3 + 3O_2 \rightarrow 2B_2O_3 + 6Br_2(II.21)$$

➤ A partir de sources gazeuses

Les dopants gazeux sont introduits directement dans le tube ou bien avant d'être introduits ils peuvent être dilués en amont de l'injecteur par un autre gaz porteur tel que l'azote. Les sourcesgazeuses permettant la formation du verre de bore, sont le diborane

 (B_2H_6) et le trichlorure de bore (BCl_3) . La relation chimique se traduit par l'expression [10,11]

 $B_2H_6 + 3O_2 \longrightarrow 2B_2O_3 + 3H_2O(II.22)$

Dans ce procédé de diffusion il n y a pas de bulleur dans le système.

> A partir de sources solides

Dans ce cas, une nacelle dopante est disposée dans le tube. Les sources dopantes solides sous forme de plaquettes sont disposées entre les plaques adjacentes de silicium ou juste à côté. L'azote et l'oxygène sont utilisés comme gaz porteurs, leurs débits à l'intérieure du tube sont contrôlé. Parmi les sources solides, on distingue plus particulièrement le nitrure de bore BN .Cette source est disponible sous forme de dépôt sur le wafer en céramique. Le substrat est constitué de deux faces déposées avec du nitrure de bore qui est préalablement oxydé à haute température sous atmosphère oxygénée (25%) pour former en surface le B_2O_3 :

$$4BN + 3O_2 \longrightarrow 2B_2O_3 + 2N_2 \tag{II.23}$$

Ces techniques de dopage par source solide sont difficilement industrialisables car elles utilisent de l'espace à l'intérieur du tube ce qui réduit le nombre de wafers pouvant être dopés simultanément [12,13].

II.8.Résolution numérique unidimensionnelles de système d'équation de diffusion (régime instationnaire)

Les solutions analytiques étant établies pour des conditions aux limites de type Dirichlet et pour un milieu semi infini, nous devons recourir aux méthodes numériques pour considérer des cas plus complexes. Parmi les nombreuses méthodes connues, la méthode numérique que nous avons retenue dans le cadre de notre étude est la méthode des différences finies.

La méthode des différences finies consiste à remplacer les dérivées partielles par des différences divisées ou combinaisons de valeurs ponctuelles de la fonction en un nombre fini de points discrets ou nœuds du maillage[14].

Nous donnerons les discrétisations spatiale et temporelle de l'équation de diffusion en régimeinstationnaire à résoudre.

II.8.1.Méthode des différences finis

La méthode des différences finies est de parmi les méthodes d'approximation des EDP. L'idée de base consiste à approximer les dérivées (spatiales ou temporelles) des équations

aux dérivées partielle en utilisant des développements de Taylor. Un des avantages majeurs de cette méthode est sa simplicité de mise en œuvre. De plus, le passage à des approximations d'ordre élevé peut se faire à un coût de calcul faible. L'inconvénient de la méthode des différences finies est la précision et la manque de flexibilité. Cela provient du fait que l'application de cette méthode nécessite plus de régularité de la solution et du maillage [15, 16].

II.8.1.1.Discrétisation spatiale

Soit C(x, y, z, t) le champ de concentration, une fonction de l'espace et du temps. Les hypothèsespermettent d'écrire :

$$C(x, y, z, t) = C(x, t)(\text{II.24})$$

Afin de simplifier les écritures, on considérera dans un premier temps que nous sommes enrégime permanent. Le membre de gauche de l'équation étant supposé nul, on peut écrire:

 $C(x, y, z, t) \equiv C(x)$. Soit C_i la valeur discrète de C(x) au point x_i , tel que $C_i = C(x_i)$.

La détermination de la grandeur C(x) est faite sur un intervalle donné $[0,L_x]$,où L_x désigne lalongueur de l'intervalle.

La recherche d'une solution discrète de la grandeur Cmène à considérerun maillage sur l'intervalle de définition.

Le maillage pris en compte est composé de N_x +1points x_i pour i allant de 0 à N_x , avec N_x le nombre de points maximal souhaité pour subdiviserl'intervalle de définition.

Les points du maillage sont espacés régulièrement avec un pas d'espace Δx . Ainsi, les points $x_i = i \cdot \Delta x$ sont appelés nœuds du maillage.

Un développement de Taylorà l'ordre 4, au voisinage de x_i , permet de construire le schéma d'approximation de la dérivéeseconde de C (équation II.18)[17] :

$$C_{i+1} = C_i + \Delta x \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_i + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\right)_i + \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{\partial^3 C}{\partial x^3}\right)_i + 0(\Delta x^4) (\text{II.25})$$
$$C_{i-1} = C_i - \Delta x \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_i + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\right)_i - \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{\partial^3 C}{\partial x^3}\right)_i + 0(\Delta x^4) (\text{II.26})$$

La somme de ces deux égalités aboutit à :

$$\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\right)_i = \frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{\Delta x^2} (\text{II}.27)$$

Le schéma obtenu en (II.21) est une approximation dite « centrée » de la dérivée seconde de *C*,d'ordre 2 en espace.

II.8.1.2.Discrétisationtemporelle

On ne considère plus le régime permanent et le membre de gauche de l'équation de diffusion doitêtre discrétisé. Le domaine temporel est discrétisé avec un pas constant Δt et on posera[18]:

$$t_k = k. \Delta t, \forall k \in \{1, \dots, N_t\}$$
(II.28)

La dérivée d'une fonction par définition est donnée par :

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial x} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{C(x,t+\Delta t)}{\Delta t} - \frac{C(x,\Delta t)}{\Delta t}$$
(II.29)

Si Δt est infiniment petit, un développement de Taylor de $C(x, t + \Delta t)$ au voisinage de t conduit à :

$$C(x,t + \Delta t) = C(x,t) + \Delta t \left(\frac{\partial C(x,t)}{\partial t}\right) + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2}\right) + 0(\Delta t^3) (\text{II.30})$$
$$\frac{C(x,t + \Delta t) - C(x,\Delta t)}{\Delta t} = \frac{\partial C(x,t)}{\partial t} + 0(\Delta t) (\text{II.31})$$

L'approximation de $\frac{\partial C(x,t)}{\partial t}$ est d'ordre 1 en temps.

Par la suite, on notera C_i^k la concentration au nœud $x_i = i \Delta x$ et au temps $t = k \Delta t$.

On se fixe deux nombres N_X et N_T qui vont déterminer le nombre de nœuds de calcul ; nous obtenons alors : $\Delta x = L/N_X$ et $\Delta t = T/N_T$.

II.8.1.3. Schémas numériques pour la résolution de l'équation de la diffusion

La résolution du schéma numérique se fera par la méthode aux différences finies et selon une schéma Euler implicite qui utilise une discrétisation au nœud x_i et à l'itération k+1.Ce schéma, en se référant à la notation précédente, permet d'écrire sous la forme discrète les dérivées de laconcentration C par rapport au temps et à l'espace (II.1) [18]:

$$\left(\frac{\partial c}{\partial t}\right)_{i}^{k+1} = \frac{c_{i}^{k+1} - c_{i}^{k}}{\Delta t} (\text{II.32})$$
$$\left(\frac{\partial^{2} c}{\partial x^{2}}\right)_{i}^{k+1} = \frac{c_{i+1}^{k+1} - 2c_{i}^{k+1} + c_{i}^{k+1}}{\Delta x^{2}} (\text{II.33})$$

En remplaçant dans II.18, on obtient :

$$C_{i}^{k+1} = \alpha C_{i+1}^{k} + (1 - 2\alpha)C_{i}^{k} + \alpha C_{i-1}^{k}(\text{II. 34})$$

Par la méthode de Crank - Nicholson :

$$\frac{C_{i}^{k+1} - C_{i}^{k}}{\Delta t} = \frac{D}{2} \left(\frac{C_{i+1}^{k+1} - 2C_{i}^{k+1} + C_{i-1}^{k} + C_{i-1}^{k} - 2C_{i}^{k} + C_{i-1}^{k}}{\Delta x^{2}} \right) (\text{II.35})$$
$$\alpha C_{i-1}^{k} + (2 - 2\alpha) C_{i}^{k} + \alpha C_{i+1}^{k} = -\alpha C_{i-1}^{k+1} + (2 - 2\alpha) C_{i}^{k+1} - \alpha C_{i+1}^{k+1} (\text{II.36})$$

A chaque itération, le vecteur des inconnues discrètes est déterminé en résolvant un système linéaire. La matrice du système étant tri diagonale, l'algorithme de *Thomas* basé sur la méthode du pivot de Gauss est utilisé pour résoudre le système matriciel.

II.8.2. Résolution approchée de l'équation de diffusion

Le flux de dopants qui passe d'une tranche à une autre; est exprimé par la première loi de Fick:

$$J = -D \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} (\text{II.37})$$

On discrétisent cette loi:

$$J_{i}^{k} = -D_{i}^{k} \frac{C_{i}^{k} - C_{i-1}^{k}}{\Delta x} (\text{II.38})$$

La 2^{éme} loi de Fick:

$$\frac{C_{i}^{k} - C_{i}^{k-1}}{\Delta t} = \frac{J_{i}^{k} - J_{i+1}^{k}}{\Delta x}$$
(II.39)
$$\frac{C_{i}^{k} - C_{i}^{k-1}}{\Delta t} = \left(-D_{i}^{k} \frac{C_{i}^{k} - C_{i-1}^{k}}{\Delta x} + D_{i+1}^{k} \frac{C_{i+1}^{k} - C_{i}^{k}}{\Delta x} \right) / \Delta x$$
(II.40)

On pose:

$$A_0 = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$$
$$A_{i+1}^k = A_0 D_{i+1}^k$$

D'où :

$$C_i^{k-1} = -C_i^k C_{i-1}^k + \left(1 + A_i^k + A_i^{k+1}\right) C_i^k - A_{i+1}^k C_{i+1}^k (\text{II.41})$$

Condition aux limites:

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad \text{à } x = 0 \text{ c'est-à-dire } : C_0^k = C_1^k$$

$$C_1^{k-1} = (1 + A_2^k)C_1^k - A_iC_2^k(\text{II.42})$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad \text{à } x = L \text{c'est-à-dire} : C_i^k = C_{i+1}^k$$

$$C_i^{k-1} = (1 + A_i^k)C_i^k - A_i^kC_{i-1}^k(\text{II.43})$$

II.9. Conclusion

Au cours de ce deuxième chapitre, nous avons exposé l'équation de Fick qui est le point dedépart de tout essai de modélisation de diffusion, on a développé un modèle théorique de ladiffusion du bore et phosphore dans les films de silicium. Le modèle tient compte dumécanisme lacunaire de diffusion.

Nous avons présenté la résolution numérique unidimensionnelle du modèle proposé enutilisant la méthode des différences finies. Cette méthode est basée sur la discrétisation dudomaine et en suivant un algorithme bien défini, on arrive à la transformation les équationsdifférentielle par une forme analytique approchée conduisant à une résolution simultanée d'unsystème d'équations linéaires, rétablis sous forme de matrices tri diagonales.

II.10. Références bibliographies

- [1] H.Lachachi, «Etude de la diffusion du bore et de la passivation des défauts dans les cellules solaires au silicium type N à haut rendement », Thèse de doctorat, université abou-bekrbelkaid, Tlemcen, Alger, (2018).
- [2] F.Boucard, «Modélisation de la diffusion des dopants dans le silicium pour la réalisation de jonctions fines», Thèse de doctorat, 'Université Louis Pasteur Strasbourg, (2003).
- [3] S. M. Sze, Semiconductor Devices Physics and Technology, Wiley, (2002).
- [4] W. Scotten, Diffusion in silicon, IC Knowledge LLC, (2000).
- [5] *H*. *Mathieu*, "Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques", *Masson*, (1987).
- [6] S. Coutanson, « Étude Du Dopage Laser En Phases Solide Et Liquide : Application à La Formation De Jonctions Ultra-Minces Dans Le Silicium », Strasbourg I France, Université Louis Pasteur: PhD, (2008).
- [7] T. Schutz-Kuchly, « Investigation du silicium de qualité solaire de type n pour la fabrication de cellules photovoltaïques »,doctorat(2013).
- [8] O. Cyril, « Dopage bore du silicium multicristallin de type n : application à la fabrication de cellules photovoltaïques par un procédé industriel », Montpellier: PhD, (2011).
- [9] L.Yang, J.Yang, X. Fang, Y. Shi, J.Wang, Q. Ye, J. Huang, X. Li et C. Wu, «Boron Diffusion of the Silicon Solar Cell with BBr3,» chez in Proceedings of ISES World Congress, (2007).
- [10] F. Ren, W. S. Hobson, J. R. Lothian, J. Lopata, J. A. Caballero, S. J. Pearton et M. W. Cole, «High rate dry etching of InGaP in BCl3 plasma chemistries,» Applied Physics Letters, vol. 67,(1995).
- [11] F. Sarubbi, L. K. Nanver et T. L. M. Scholtes, «High Effective Gummel Number of CVD Boron Layers in Ultra shallow p+n Diode Configurations,» Electron Device, IEEE, vol. 57, pp. 1269 1278,(2010).
- [12] M. Shohno et K. Hirayama, «CVD-BN for Boron Diffusion in Si and Its Application to Si Devices,» Journal of The Electrochemical Society, vol. 122, pp. 1671-1676, (1975).
- [13] K. Choong-Ki, K. Kyeong-Tae, «Formation of shallow p+-n junctions using boronnitride solid diffusion source,» Electron Device Letters, IEEE, vol. 8, pp. 569-571, (1987).
- [14] F.Roger, « méthodologie de calibrage de simulation utilisés en micro-électronique application à l'implantation ionique et à la mobilité des porteurs », Thèse de doctorat , Institut National Polytechnique de Grenoble,(2002).
- [15] W.Harris, H.Stocker, « Handbook of mathematics and computational science », P.409-465, (1998).
- [16] *R. Kress, « Numerical analysis » ,P;5-23,(1998).*
- [17] O.Bonnaud, «Cour Physique des Solides, des Semi-conducteurs et Dispositifs», (2010).

[18] H.Mathieu, «Physique des électroniques»,Dunod Editor,(2001). semi-conducteurs et des composants

Chapitre III

Résultats et discussions

III.1.Introduction

La formation de l'émetteur via une diffusionde Bore est bien connue et utilisée avec succès au sein de l'industrie de production des cellules photovoltaïques à travers le monde [1].

Parmi les technologies des cellules solaires émergentes, nous distinguons plus particulièrement les cellules à base de silicium de type n à émetteur dopé bore.Ce procédé de dopage au Bore est basé sur une source dopante très peu utilisée pour la fabrication des émetteurs de cellules photovoltaïques, le trichlorure de Bore (BCl₃).

Dans ce chapitre, nous présentons d'une façon détaillée de diffusion de bore, La simulation numérique de la diffusion du bore est d'une grande pertinence pour l'amélioration de la cellule solaire au silicium cristallin de type n. Nous décrivons la structure de la cellule solaire type n à simuler et nous ferons une étude de simulation effectuée sous PC1D, PC2D, MATLAB et PVsyst. les résultats obtenus par simulation numérique sont présentés et discutés.

III.2. Coefficient de diffusion

On retrouve sur la figure III.1, les résultats obtenus par ces différentes méthodes de caractérisation .ces résultats, issus de différentes méthodes de caractérisation, semblent donner pour le coefficient de diffusion de silicium à une énergie d'activation comprise entre 4,5 et 5.0ev[2].



Figure.III.1.Coefficients de diffusion intrinsèque des principaux dopants utilisés en micro-électronique.

III.3.Mécanisme de diffusion du bore

Dans la littérature, le bore diffuse principalement par le mécanisme interstitiel [3]. Les mécanismes possibles pour la diffusion bore sont les réactions kick-out et interstitielles, où l'interaction entre bore substitutive (et une auto-interstitielle (I) conduit à une espèce mobile formée par un couple interstitiel B ou BI, respectivement,

$$B_s + I \rightarrow (B_i)_{mobile}$$
 (Kick-out)
 $B_s + I \rightarrow (BI)_{mobile}$ (Interstitial)

Le mécanisme microscopique, les simulations ab initio de Monte Carlo ont encore révélé que le bore diffuse via le mécanisme d'interstitiel au lieu du mécanisme de kick-out [4,5]. Par conséquent, la diffusion du bore est liée aux paires interstitielles du bore au lieu des atomes du bore interstitiels.Selon les lois de Fick, la diffusion de bore avec une source finie aboutit à un profil gaussien dont le pic de dopage diminue avec le temps de drive-in [6,7].

III.4.Profil expérimentale de la diffusion bore



Figure.III.2 Profil de diffusion expérimental du bore dans le silicium obtenu par SIMS.

Le substrat dopé initialement phosphore à une concentration d'environ 10^{16} cm⁻³ possède une résistivité de 1.5 Ω .cm. Avant de tracer le profil de diffusion par des mesures SIMS (Secondary Ion Mass Spectroscopy), les wafers passent par une gravure HF à 10% pendant 5 minutes afin de décaper le verre de bore restant à la surface des cellules. Le profil de diffusion de la figure (III.2) est alors obtenu, il caractérise la distribution des atomes de bore dans le substrat.

III.5. Simulation du profil de diffusion du bore dans le silicium

Le profil de diffusion du bore a un fort impact sur l'activité de recombinaison dans la région d'émetteur via Auger et la recombinaison de surface. Il est recommandé d'optimiser le profil de diffusion du bore afin de minimiser la recombinaison Auger et en surface tout en maintenant une résistance de contact raisonnablement faible.

Le profil de dopage dépend d'un grand nombre de paramètres. Ces paramètres liés aucouche utilisé et les procèdes technologiques (Energie d'implantation, masse de l'ion, Température et le temps de recuits....) interdépendants ce qui rend indispensable l'étude de l'influence de tous ces paramètres sur la prédiction du comportement des profils de l'implantation. Pour étudier l'influence d'un paramètre, nous allons le faire varier sur un intervalle donné tout en fixant tous les autres paramètres.

Nous avons procédé à la recherche numérique opérationnelle du profil optimal de diffusion bore à partir d'une source gazeuse BCl₃ en utilisant le logiciel de *Matlab*. Cette partie est dédiée à la détermination des effets des paramètres physiques sur le profil de diffusion du bore.

Dans cette partie nous allons discuter l'impact des principaux paramètres du procédé de dopage bore pouvant être modifié, car la qualité de l'émetteur p⁺est liée aux conditions de diffusion thermique du four Lydop (pression, concentration du dopant, température, temps).

Nous avons effectué une modélisation du comportement de trois paramètres importants (concentration, temps et température) sur l'allure du profil de diffusion sur surface plane.

III.5.1.Influence de la température

La température est un paramètre très important dans le procédé de diffusion. La figure (III.3) présente les profils de diffusion du bore, dans une gamme de températures allant de 700°C à 850°C. Lorsque la température augmente, la profondeur de la jonction augmente, ce qui traduit une diminution de la résistance carrée.



Figure.III.3. Profils de diffusion de Bore pour différentestempératures.

On observe une légère variation au niveau de la profondeur de diffusion et la diminution de la concentration maximale.

Il a été montré expérimentalement que l'augmentation de la température de diffusion peut entrainer la formation d'une couche riche en Bore (BRL pour BoronRich Layer) qui est indésirable à l'interface émetteur/substrat qui va dégrader la durée de vie des porteurs minoritaires de la cellule sous certaines conditions. Cette couche de BRL est présente lorsquela température de diffusion est élevée, elle est représentée par une concentration plus élevée d'atomes de bore en surface du wafer.

III.5.2.Temps de diffusion

Le temps est un paramètre très important dans la diffusion du bore. La figure III.4montre l'impact du temps de la diffusion sur la profondeur.La profondeur de diffusion du Bore augmente sensiblement avec la durée de diffusion.



Figure.III.4. Variation des profils de diffusion bore dans le silicium en fonction du temps de diffusion.

III.5.3.La concentration du bore

La figure (III.5) montrent l'effet de la dose sur les profils de diffusion du Bore, nous observons que la profondeur de diffusion augmente sensiblement avec l'augmentation de la dose en surface. Nous remarquons également un accroissement de la concentration maximale et de la profondeur de diffusion en fonction de la dose.

Lorsque la concentration du BCl₃ est élevée, la profondeur est plus profonde, puisqu'aux faibles concentrations de dopants, la quantité de bore est insuffisante pour obtenir un verre de bore (BSG) uniforme.



Figure. III. 5. Profils de diffusion de bore pour les différentes doses.

III.6.Optimisation de la cellule solaire de type N

L'optimisation des paramètres des différentes régions (base, émetteur et du BSF) ont un effet considérable sur l'efficacité de la cellule solaire.

La durée de vie, la résistivité et l'épaisseur sont les paramètres les plus importants du substrat (la Base). Ces paramètres ont un rôle dans la collecte des porteurs de charge et donc indirectement sur son rendement de conversion.

D'autre part, la résistance carrée de l'émetteur a également un effet sur les courants de recombinaisons, et par conséquent sur la tension de circuit ouvert.

Par ailleurs, la couche du BSF a aussi un effet important sur les performances de la cellule. Le BSF crée une barrière de potentiel tendant à confiner les porteurs minoritaires (trous) dans la région la moins dopée et aide à les conduire vers la face avant, en améliorant ainsi le rendement de conversion.

Couche antireflet	
$i_{réfraction}$	2
e _{antireflet}	75
Textu	vrisation
θ (°)	54
$h(\mu m)$	3
L'éme	etteur P ⁺
$X_j(\mu m)$	0.5
$C_s(Cm^{-3})$	10 ²⁰
l	Base
$\rho(\Omega cm^{-1})$	0.3
$ au(\mu s)$	1
$X_e(\mu m)$	200
	BSF
$X_{BSF}(\mu m)$	5
$C_{BSF}(Cm^{-3})$	10 ²⁰

Les paramètres de simulation numérique sont résumés dans le tableau ci-dessous:

Tableau III.1 : Paramètres de la structure simulée.

III.6.1.Effet de la couche anti reflet

La figure(III.6) montre l'influence de l'épaisseur de la couche anti reflet sur le rendement. On remarque que le rendement trouve son maximum entre deux points $(7, 7.5).10^{-10}$

⁸ de l'épaisseur de la couche antireflet. Il subit une diminution qui est due à l'absorption optique augmentée.



Figure.III. 6. Influence de l'épaisseur de la couche anti reflet sur le rendement.



Figure.III.7. L'influence de l'indice de réfraction sur le rendement.

La figure(III.7) concernant le rendement en fonction de l'indice de réfraction .On remarque qu'il ya une augmentation du rendement jusqu'à 2 à peu prés.

III.6.2.Effet de l'émetteur

L'augmentation de la concentration de l'émetteur (Figure III.8), engendre la diminution du rendement, le courant de court-circuit et la tension circuit ouvert de la cellule. Ceci est expliqué par l'augmentation de courant de recombinaison dans l'émetteur.

Lorsque la profondeur de jonction augmente, une diminution de rendement se produit. Ceci est dû à une augmentation de la recombinaison des porteurs avant d'arriver à la zone de charge d'espace.



Figure.III.8. Influence de la profondeur de jonction sur le rendement.

D'après les résultats obtenus, nous pouvons conclure que le rendement diminué avec l'augmentation de la profondeur de la jonction de la cellule. Donc c'est un facteur important pour l'absorption des photons.

III.6.3.Effet de la base

III.6.3.1.Influence de la durée de vie

Dans la figure (III.9), On remarque qu'il y a une augmentation du rendement avec l'augmentation de la durée de vie des porteurs minoritaire qui est due à l'élimination de recombinaison en volume.



Figure.III.9.Influence de la durée de vie sue le rendement.

III.6.4.Effet de BSF

La Figure III-10 on observe que le rendement augmentent avec l'augmentation de l'épaisseur du BSF.



Figure.III.10.Effet de l'épaisseur BSF sur le rendement de la cellule solaire.

III.7. Conclusion

Dans ce chapitre la simulation a montré que le profil final du dopant ayant diffusé dans le silicium est fortement liée par les paramètres de la surface. Deux effets importants doivent principalement être pris en compte lors de la diffusion thermique dans le silicium, la température et l'influence du temps de diffusion. Les profils obtenus par simulation mettent clairement en évidence ces effets. A la fin du chapitre une optimisation des paramètres les plus importants de la cellule solaire. Pour la base, on a constaté que tous les paramètres de la cellule augmentent jusqu'à la valeur de 0.001 s de la durée de vie, de même le rendement de

conversion augmente avec l'épaisseur de la base, puis ils diminuent en raison de l'augmentation de la résistance carré. L'analyse de l'émetteur de la cellule solaire montre que le rendement diminuent avec l'augmentation de la profondeur , du courant de, et enfin l'introduction du BSF a considérablement amélioré les paramètres de la cellule.

III.8. Références bibliographiques

- [1] M. Gauthier, M. Grau, O. Nichiporuk, F. Madon, V. M.-T. Yen, N. L. Quang, A. Zerga, A. Slaoui, D. Blanc-Pélissier, A. Kaminski et a. M. Lemiti, «IndustrialApproaches of SelectiveEmitter on MulticrystallineSiliconSolarCells», chez 24th EPVSEC, Hamburg, (2009).
- [2] F.Boucard, « Modélisation de la diffusion des dopants dans le silicium pour la réalisation de jonction fines », Université Louis pasteur –Strasbourg I, Français, (2003).
- [3] N.B. Cowern, K. Janssen, G. V. d. Walleand et D. Gravesteijn, «Impurity diffusion via an intermediate species: The B-Si system,» Physical Review Letters, vol. 65, p. 24-34, (1990).
- [4] B. Sadigh, T. Lenosky, S. K. Theiss, M. Caturla., T. D. d. l. Rubia et M. Foad, «Mechanism of Boron Diffusion in Silicon: An Ab Initio and Kinetic Monte Carlo Study,» Physical Review Letters, vol. 83, (1999).
- [5] W. Windl, M. M. Bunea, R. Stumpf, S. T. Dunham et M. P. Masquelier, «First Principles Study of Boron Diffusion in Silicon,» Physical Review Letters, vol. 83, (1999).
- [6] S. Coutanson, « Étude Du Dopage Laser En Phases Solide Et Liquide : Application à La Formation De Jonctions Ultra-Minces Dans Le Silicium », Strasbourg I France, Université Louis Pasteur: PhD, (2008).
- [7] H. Bracht, H. H.Silvestri, I. D.Sharp et E. E. Haller, «Self- and foreign-atom diffusion in semiconductor isotope heterostructures. II. Experimental results for silicon,» Physical Review B, vol. 75, (2007).
- [8] D. D. Salvador, E. Napolitani, G. Bisognin, M. Pesce, A.Carnera, E.Bruno, G. Impellizzeri et S. Mirabella, «Boron diffusion in extrinsicallydopedcrystallinesilicon,» PhysicalReview B, vol. 81, n°14,(2010).

Conclusion générale

La demande mondiale en énergie évolue rapidement et les ressources naturelles del'énergie telles que l'uranium, le gaz et le pétrole diminuent en raison d'une grande diffusion etdéveloppement de l'industrie ces dernières années. Pour couvrir les besoins en énergie, desrecherches ont out conduit à l'énergie renouvelable. Une des énergies renouvelables qui peutaccomplir la demande est l'énergie solaire photovoltaïque, c'est une énergie propre,silencieuse, disponible et gratuite. C'est d'ailleurs ce qui explique que son utilisation connaîtune croissance significative dans le monde.

Le travail qu'on a présenté porte sur l'analyse d'une modélisation et simulation de la diffusion de bore dans le silicium photovoltaïque.

En effet, pour la conception des systèmes photovoltaïques, la donnée la plus utile estrayonnement solaire reçu par le panneau photovoltaïque solaire, donne des généralités sur lessystèmes PV, l'effet PV, principe de cellule PV, Ainsi, les pertes technologiques. la modélisation et la simulation d'un module photovoltaïque.

Nous avons étudié les conditions optimales pour l'obtention d'un profil de dopage bore capable d'améliorer la qualité de l'émetteur les différents paramètres influençant sur le rendement, et la qualité des cellules produites.

Dans ce travail, des simulations sous MATLAB et PC1D, PC2D et PV Sys ont précisé les influences des temps et température et la concentration sur le rendement de la cellule photovoltaïque.

Nous avons obtenu les résultats suivants pour la simulation du profil de diffusion du bore dans le silicium:

- l'influence de l'épaisseur de la couche anti reflet sur le rendement. Qui se trouve son maximum entre deux points (7 ; 7.5).10⁻⁸ de l'épaisseur de la couche antireflet.
- le rendement en fonction de l'indice de réfraction, qu'il y a une augmentation du rendement jusqu'à 2.
- L'augmentation de la concentration des dopants dans l'émetteur engendre la diminution du rendement.
- Une augmentation du rendement avec l'augmentation de la durée de vie des porteurs minoritaire.
- > Observe que le rendement augmente avec l'augmentation de l'épaisseur du BSF.