

Table des matières

1	Introduction	9
1.1	Contexte actuel de la filière photovoltaïque	10
1.2	Objectifs des travaux	13
2	Caractéristiques de l'hétérojonction a-Si:H/c-Si	15
2.1	Diagramme des bandes	17
2.2	Paramètres du a-Si:H	18
2.3	Zone d'inversion et canal de conduction à l'interface de l'hétérojonction	20
2.4	Etat de l'art des modèles de mécanismes de conduction dans les cellules à hétérojonction a-Si:H/c-Si	22
2.4.1	Mécanismes de transport à l'obscurité	23
2.4.2	Mécanismes de transport sous lumière	25
2.4.3	Forme des courbes I(V) à l'obscurité et sous lumière	26
2.5	Mécanismes de recombinaison et durée de vie des porteurs	28
2.5.1	Mécanismes de recombinaison en volume des matériaux semiconducteurs . .	28
2.5.1.1	Recombinaisons radiatives	28
2.5.1.2	Recombinaisons Auger	29
2.5.1.3	Recombinaisons Shockley-Read-Hall (SRH)	30
2.5.2	Recombinaisons d'interface et types de défauts à l'hétérojonction de silicium	32
2.5.3	Durée de vie effective	33
3	Description des méthodes expérimentales et des méthodes de simulation	35
3.1	Principe de la mesure de conductivité	37
3.1.1	Dans le cas d'une couche mince	37

3.1.2	Dans le cas d'une hétérojonction	38
3.2	Principe de la mesure de PhotoLuminescence Modulée (MPL)	42
3.3	Principe de la mesure de PhotoCourant Modulé (MPC)	47
3.3.1	MPC-HF	49
3.3.2	MPC-BF	51
3.4	Description de l'outil de simulation Silvaco ATLAS	53
4	Étude expérimentale des propriétés d'interface de l'hétérostructure c-Si/a-Si:H	61
4.1	Mesures de conductance coplanaire pour l'étude des propriétés de l'hétérojonction .	62
4.1.1	Description des échantillons	62
4.1.2	Résultats des mesures de conductance planaire	62
4.2	Couplage des techniques de PhotoCourant (MPC) et PhotoLuminescence Modulées (MPL) pour l'étude de l'interface c-Si/a-Si:H	72
4.2.1	Description du banc expérimental	73
4.2.2	Mesures de PhotoLuminescence Modulée	77
4.2.2.1	Mesures MPL sur les quarts de wafers	77
4.2.2.2	Comparaison avec les meures de PCD (Sinton)	79
4.2.2.3	Mesures MPL sur les échantillons clivés	80
4.2.2.4	Simulation de la technique MPL	81
4.2.2.5	Détermination de la densité de défauts d'interface	84
4.2.3	Mesures de PhotoCourant Modulé	87
4.2.3.1	Résultats de mesures	87
4.2.3.2	Simulation de la technique MPC	89
4.2.3.3	Étude de la sensibilité de la mesure MPC à quelques paramètres . .	95
4.2.4	Conclusions et perspectives	100
5	Application de l'hétérostructure c-Si/a-Si:H dans des dispositifs à base de nano-fils à jonction radiale	103
5.1	Contexte de l'étude	104
5.1.1	Projet SOLARIUM	104
5.1.2	Choix de la structure à modéliser	105
5.1.3	Simulations TCAD préliminaires	106

5.2	Réalisation du couplage électrique/optique	111
5.2.1	Simulations optiques	112
5.2.2	Couplage	113
5.3	Résultats de simulations	115
5.3.1	Étude de l'influence des cellules radiale et planaire sur l'efficacité de la cellule complète à base de nanofils	118
5.3.2	Une couche tampon pour limiter la dégradation de l'efficacité de la cellule . .	123
5.4	Conclusions et perspectives	132
6	Conclusions et perspectives	137
	Annexes	143
A	Description des paramètres de modélisation des défauts dans le a-Si:H	145
B	Modèle analytique de la conductance appliqué à une hétérojonction	147
C	Principe de la mesure du Déclin de PhotoConductance (PCD)	151
D	Définition des paramètres clés définissant les performances d'une cellule photo- voltaïque	155
	Bibliographie	157
	Communications de l'auteure	164

Chapitre 1

Introduction

1.1 Contexte actuel de la filière photovoltaïque

Dans le contexte actuel du marché grandissant du secteur des énergies renouvelables, une place importante est occupée par la filière photovoltaïque. En effet, la ressource d'origine solaire est inépuisable à l'échelle humaine et le potentiel de conversion d'énergie est très important. Cependant, les rendements de conversion actuels sont soit relativement loin des rendements maximums théoriques, ou bien les technologies restent encore trop coûteuses par rapport aux autres types d'énergie. C'est pourquoi les laboratoires académiques et les industriels s'emploient aujourd'hui à la recherche de nouveaux matériaux ou de nouvelles techniques pour repousser ces limites de rendement et de coût. L'évolution des rendements records au fil des années, pour chaque type de technologie, sont référencés sur un graphique (Figure 1-1) par le Laboratoire National des Énergies Renouvelables (NREL).

Il existe trois grands types de générations de cellules. La première regroupe les cellules photovoltaïques à base de silicium mono/polycristallin (représentée en bleu sur la Figure 1-1). Les rendements atteints sont de l'ordre de 15-20 % [1] en moyenne pour les modules. Cependant cette technologie nécessite un cristal très pur et une quantité de matière relativement élevée à cause de la faible absorption dans le silicium et des pertes de matière lors du processus de sciage, donc de grandes quantités d'énergie pour la production. Il s'agit néanmoins du type de cellules le plus répandu aujourd'hui dans le commerce (environ 80-90 %). Le rendement record d'une cellule de laboratoire en silicium monocristallin à technologie IBC (Interdigitated Back Contacts) est de 26.1 % et s'élève à 26.6 % pour la technologie HIT (Heterojunction with Intrinsic Thin-layer) couplée à la technologie IBC.

La seconde génération de cellules est basée sur des couches minces semi-conductrices: silicium amorphe (a-Si:H), CIGS ou encore CdTe (représentée en vert sur la Figure 1-1). Les rendements atteints sont de l'ordre de 12-19% pour les modules [1] mais la faible quantité de matière utilisée, en raison du bon taux d'absorption de ces matériaux, ainsi que des substrats bas coût donnent un fort potentiel de réduction du prix de production de cette technologie. Le rendement record d'une cellule de laboratoire en CIGS est de 22.9 %, celle en CdTe est de 22.1 %, et celle en a-Si:H est de 10.2 %. Le rendement de 14 % indiqué pour cette technologie sur la Figure 1-1 correspond à une tandem entre le a-Si:H et le μ c-Si.

La troisième génération regroupe un ensemble de cellules qui sortent du cadre des cellules conven-

Best Research-Cell Efficiencies

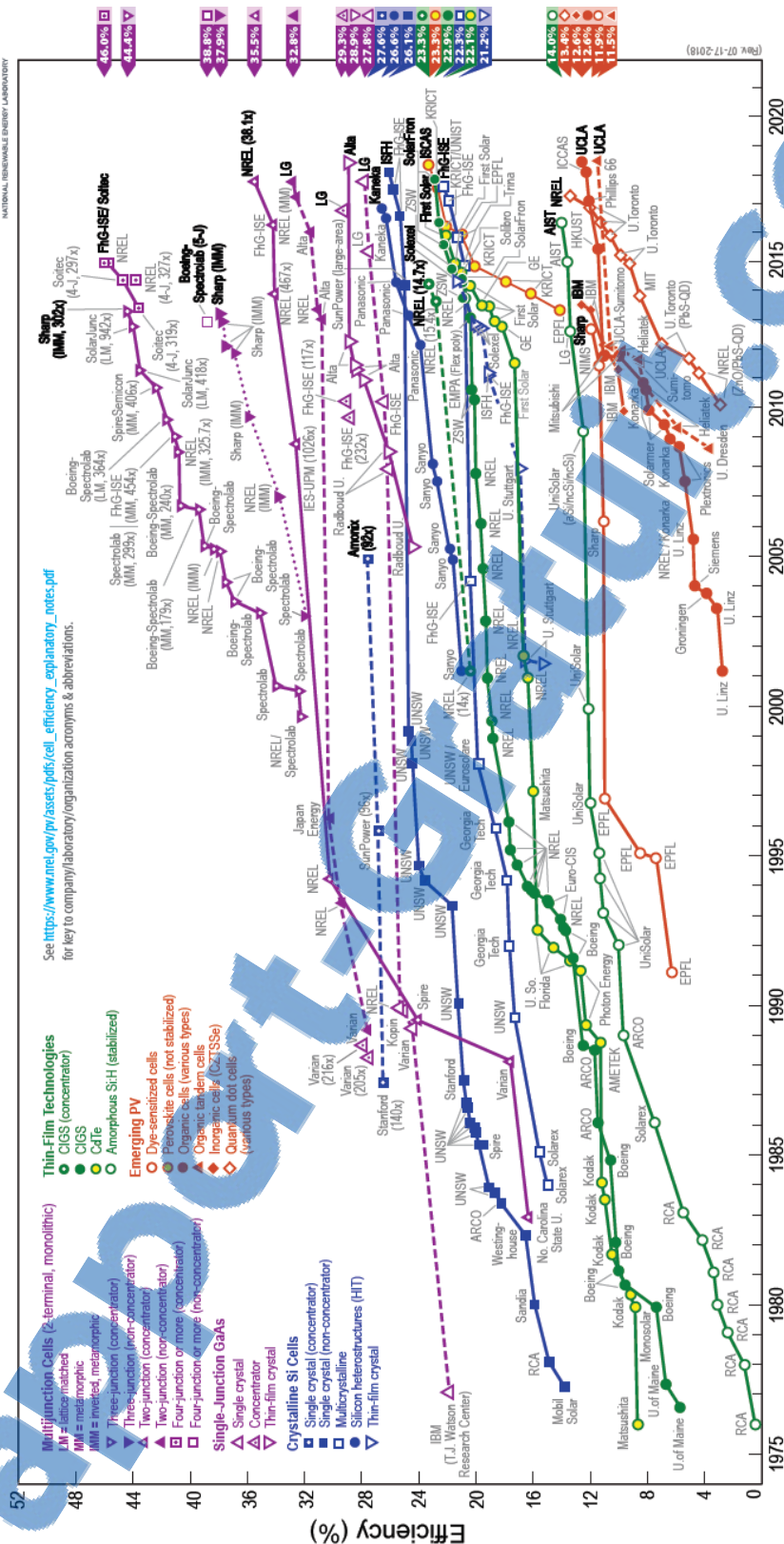


FIGURE 1-1 – Graphique NREL de l'évolution des rendements records des cellules photovoltaïques expérimentales en fonction des années pour chaque type de technologie.

tionnelles pour aller vers des cellules à base de nouveaux types de matériaux semiconducteurs (III-V, organiques et perovskites, représentés en orange sur la Figure 1-1), des jonctions multiples (représentés en violet sur la Figure 1-1), et utilisant la nanostructuration. Les rendements records de modules à base de ces nouveaux matériaux sont de 25.1 % pour le GaAs simple jonction, 11.6 % pour les perovskites et 8.7 % pour l'organique [1]. Les cellules de laboratoire atteignent même des rendements de 28.9 %, 23.3 % (non stabilisé) et 12.6 % respectivement. La technologie multijonctions basée sur les matériaux III-V permet aujourd'hui d'atteindre un rendement record de 31.2 % pour un module sans concentrateur et allant jusqu'à > 40 % sous concentration [1]. Cependant le prix de cette technologie est très élevée, ce qui réduit son application au domaine du spatial. Le rendement record d'une cellule de laboratoire à multijonction III-V est de 38.8 % sans concentrateur et 46 % sous concentration. Dans la catégorie des cellules nanostructurées, qui permettent d'améliorer l'absorption du rayonnement solaire, nous trouvons un concept intéressant basé sur les réseaux de nanofils (non représenté sur le graphique NREL). Un rendement record de 17.8 % a été atteint pour des nanofils en InP [2].

Dans le cadre de cette thèse nous nous intéressons à deux technologies permettant d'améliorer le rendement et le coût de cellules à base de silicium. La première est l'hétérojonction a-Si:H/c-Si qui, comme nous l'avons vu, permet d'augmenter le rendement des cellules à homojonctions de c-Si. La deuxième technologie est celle du réseau de nanofils constitué d'une hétérojonction a-Si:H/c-Si radiale dont le matériau absorbeur est le silicium amorphe. L'intérêt de l'aspect radial des nanofils réside en un découplage entre l'absorption des photons, qui se fait dans la direction verticale, et la collecte des porteurs photogénérés, qui se fait dans la direction radiale. Cela permet d'allier dans une seule cellule (*i*) une bonne absorption due à la nanostructuration, et (*ii*) une collecte optimale due à la réduction du trajet des porteurs photogénérés vers les électrodes. Le matériau absorbeur n'a par conséquent pas besoin d'être très pur, ni très épais, ce qui réduit de manière considérable les coûts de production. Le silicium amorphe se trouve donc être un bon candidat pour ce type d'applications.

1.2 Objectifs des travaux

Une des problématiques dans la recherche d'amélioration des performances des cellules solaires à base d'hétérojonctions de silicium est la réduction des recombinaisons à l'interface a-Si:H/c-Si dues aux défauts. Aujourd'hui la densité d'états d'interface est déterminée à partir de mesures de spectroscopie (admittance et photoémission X ou UV) ou de la durée de vie dans le substrat cristallin grâce aux techniques de photoluminescence et déclin de photoconductivité. Cependant ces techniques nécessitent, dans la plupart des cas, de séparer la contribution des états d'interface de celle en volume.

C'est pourquoi nous étudions, dans le cadre de cette thèse, l'application de la technique de PhotoCourant Modulé (MPC) comme outil de caractérisation de l'interface a-Si:H/c-Si. En effet, celle-ci est habituellement utilisée au laboratoire pour caractériser la densité des états de défauts situés dans le gap du silicium amorphe. Nous nous basons alors sur un résultat précédent montrant la présence d'un canal de conduction latéral important dans le c-Si longeant l'interface. En effectuant des mesures de MPC avec des électrodes en configuration coplanaire, nous nous attendons donc à ce que cette technique soit sensible majoritairement aux états d'interface. L'objectif de ce travail est de valider cette hypothèse.

Dans un deuxième temps, nous nous intéressons à la technologie nanofils appliquée au cas de l'hétérojonction a-Si:H/c-Si radiale où le silicium amorphe est le matériau absorbeur. Une des problématiques principales est la détermination de son design idéal et du rendement théorique maximal. Pour répondre à cette problématique il est nécessaire de recourir aux simulations numériques. Cette étude doit prendre en compte à la fois l'aspect optique, lié aux modes d'absorption du réseau de nanofils, et électrique, permettant de déterminer l'efficacité de collecte des porteurs photogénérés. Or, dans la littérature nous trouvons pour ce types de nanofils, soit des simulations purement optiques, qui ne tiennent donc pas compte de l'efficacité de collecte [3, 4, 5], soit des simulations purement électriques, qui ne tiennent pas compte d'un taux de photogénération réaliste [6, 7]. Pourtant, il existe des études associant ces deux types de simulations pour d'autres types de nanofils [8, 9, 10]. L'objectif du travail de cette partie est donc d'apporter au laboratoire un outil permettant de coupler les simulations électriques et optiques pour pouvoir étudier la cellule à base de nanofils a-Si:H/c-Si et d'autres structures telles que les nanofils tandems.

Ce manuscrit s'organise en cinq chapitres. Dans le premier nous avons introduit le contexte et les objectifs des travaux. Dans le deuxième chapitre nous présentons un état de l'art des caractéristiques propres à une hétérojonction a-Si:H/c-Si. Dans le troisième chapitre, nous décrivons les techniques expérimentales et les méthodes de simulations utilisées pour ces travaux. Les chapitres 4 et 5 sont consacrés aux résultats de nos études.

Chapitre 2

Caractéristiques de l'hétérojonction a-Si:H/c-Si

Ce chapitre regroupe les principales caractéristiques de l'hétérojonction a-Si:H/c-Si dont il est nécessaire d'avoir connaissance pour étudier les propriétés d'interface dans le cas de la cellule HIT et l'impact de ces caractéristiques sur les performances de la cellule à base de nanofils.

Nous verrons d'abord comment se construit le diagramme de bandes d'une hétérojonction à partir du modèle d'Anderson ainsi que l'impact des propriétés des matériaux qui la composent.

Puis nous nous intéresserons aux mécanismes de conduction permettant aux porteurs libres de traverser cette hétérojonction. Pour cela nous nous baserons sur l'état de l'art actuel.

Pour finir, nous rappellerons les différents mécanismes de recombinaison *(i)* présents dans le volume de chaque matériau et *(ii)* spécifiques à l'interface. Nous présenterons à cet effet un état de l'art des modèles des types de défauts présents à l'interface a-Si:H/c-Si. Nous introduirons également à l'occasion la notion de durée de vie.

2.1 Diagramme des bandes

La structure de bandes idéale d'une hétérojonction de silicium à l'équilibre est couramment représentée selon le modèle d'Anderson [11] (Figure 2-1). Celui-ci permet de déterminer les courbures de bandes à la jonction des matériaux en se basant sur les règles d'alignement des niveaux de Fermi et de continuité du niveau du vide. La position du niveau de Fermi d'un matériau par rapport au niveau du vide est quantifié par la grandeur travail de sortie $q\Phi$ qui représente l'énergie nécessaire à un électron situé au niveau de Fermi pour atteindre le niveau du vide (i.e. pour ne plus être affecté par le champ électrostatique des porteurs de charge avoisinants). Compte tenu de la propriété d'alignement des niveaux de Fermi entre les deux matériaux à l'équilibre, et en prenant pour référence l'énergie de ce niveau, on peut schématiser la variation relative du niveau du vide. Cela permet de déterminer la position énergétique des bandes de conduction dans chaque matériau, référencées par rapport au niveau du vide par leur affinité électronique $q\chi$ (qui représente l'énergie nécessaire à un électron situé dans la bande de conduction pour atteindre le niveau du vide), ainsi que des bandes de valence séparées des bandes de conduction par l'énergie du gap. L'hétérojonction étant par définition constituée de deux matériaux de gaps (E_{g1} et E_{g2}) et d'affinités électroniques (χ_1 et χ_2) différents, le modèle d'Anderson prédit la présence de discontinuités de bandes de conduction (ΔE_c) et de valence (ΔE_v) à l'interface tels que:

$$\Delta E_c = q(\chi_2 - \chi_1) \quad (2.1)$$

$$\Delta E_v + \Delta E_c = E_{g1} - E_{g2} \quad (2.2)$$

où q est la charge d'un électron. La connaissance des paramètres des deux matériaux (énergie du gap, position du niveau de Fermi par rapport à la bande de conduction ou de valence et affinité électronique) permet de prédire les valeurs de ΔE_c et ΔE_v , et donc d'estimer les courbures de bande à l'interface.

Les paramètres E_g^{c-Si} et χ^{c-Si} du silicium cristallin sont aujourd'hui bien connus et les dopages suffisamment maîtrisés pour pouvoir déterminer avec précision la position du niveau de Fermi dans le gap ($(E_c - E_f)^{c-Si}$) et par conséquent le travail de sortie par la relation:

$$q\Phi = q\chi + (E_c - E_f) \quad (2.3)$$

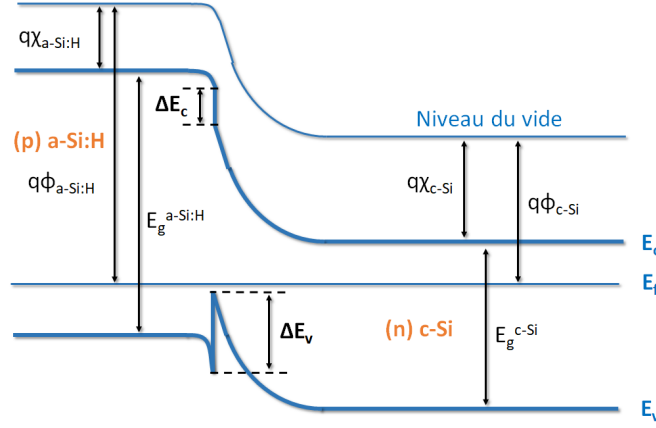


FIGURE 2-1 – Diagramme de bandes à l'équilibre d'une hétérojonction de (p)a-Si:H/(n)c-Si selon le modèle d'Anderson.

Deux types de techniques de croissance du silicium cristallin sont utilisés de nos jours dans la fabrication de cellules solaires: CZochralski (CZ) et Float-Zone (FZ).

En ce qui concerne le silicium amorphe, ses paramètres dépendent des conditions de dépôt. Il n'y a donc pas de paramètres uniques du a-Si:H. Néanmoins ils présentent des caractéristiques similaires qui peuvent donc être estimés au cas par cas grâce au modèle décrit dans la section suivante. Dans le cas de cellules à hétérojonction a-Si:H/c-Si, son épaisseur doit être suffisamment faible pour limiter les pertes par absorption mais d'autre part il faut aussi éviter qu'il ne soit entièrement déplété ce qui induirait une baisse du V_{oc} , tension de circuit ouvert de la cellule photovoltaïque (voir Annexe D pour la définition). Un a-Si:H trop fin réduirait donc les performances de la cellule. Son épaisseur optimale a été estimée à quelques nanomètres [12].

2.2 Paramètres du a-Si:H

Le silicium amorphe, malgré son hydrogénation réduisant le nombre de liaisons pendantes, présente un nombre important de défauts répartis en énergie de façon continue dans la bande interdite. Leur distribution énergétique au sein du gap est prédite par le modèle de Davis et Mott [13] (Figure 2-2). Cette distribution est modélisée par (i) deux exponentielles appelées Queue de Bande de Valence (QBV) et Queue de Bande de Conduction (QBC) ainsi que (ii) deux gaussiennes. Les premières décrivent les états localisés liés au désordre émanant des liaisons Si-Si faibles (i.e. distortion de longueur de liaisons Si-Si et d'angles de liaisons Si-Si-Si) et les secondes les états profonds correspondant aux liaisons pendantes qui dépendent de la répartition des liaisons Si-H. Dans ce

modèle les états sont monovalents, chaque ensemble $\{exponentielle + gaussienne\}$ représente un type de défauts: soit donneur soit accepteur, chacun ne pouvant prendre que deux états de charge. Les états proches de la bande de valence sont de type donneur (charge positive si vide, charge neutre si occupé) et ceux proches de la bande de conduction sont de type accepteurs (charge neutre si vide, charge négative si occupé). Une variante de ce modèle a été proposée par Powell et Deane [14] et tient compte de l'aspect amphotère des défauts: c'est le modèle du Defect Pool. Chaque état peut alors prendre l'un des trois états de charge: neutre, positif ou négatif. On les appelle aussi états corrélés.

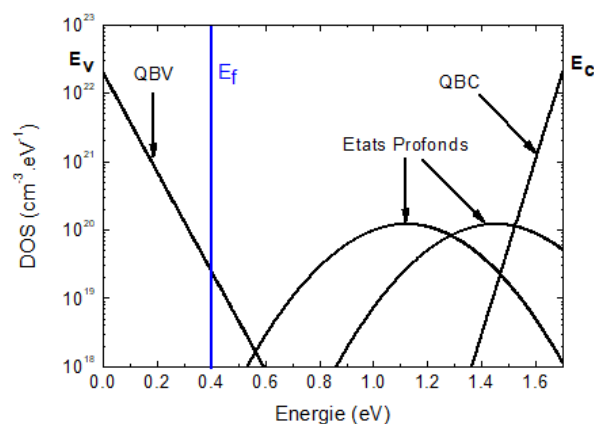


FIGURE 2-2 – Exemple de DOS pour du (p)a-Si:H et position correspondante du niveau de Fermi (dopage: $5.9 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$).

La position du niveau de Fermi dans le gap du a-Si:H résulte de l'équilibre entre la charge des porteurs libres et la charge des défauts. Elle peut donc être simulée à partir de la valeur du dopage et de la répartition de la densité d'états de défauts (DOS: Density Of States). Un logiciel a été développé par l'équipe à cet effet (DeOSt). Ce dernier utilise le modèle Defect-Pool pour déterminer la charge issue de la DOS.

D'autre part, la forme de la distribution de la DOS du silicium amorphe peut être déterminée expérimentalement par des mesures de PhotoCourant Modulé (MPC) [15]. En faisant concorder les résultats expérimentaux avec la modélisation par ajustement des paramètres de DeOSt on peut alors déterminer un modèle réaliste de la DOS, du dopage et de la position du niveau de Fermi dans le matériau. Pour les simulations numériques utilisées dans le cadre de cette thèse nous utiliserons donc un paramétrage obtenu précédemment avec DeOSt par l'équipe sur des fines couches de silicium amorphe habituellement déposées sur le c-Si lors de la conception des cellules photovoltaïques à

hétérojonction. Notons que différents ajustements de paramètres peuvent certainement conduire à des résultats finaux similaires mais dans les travaux de cette thèse le paramètre important reste la position du niveau de Fermi, par conséquent nous ne considérerons pas les autres jeux de paramètres qui peuvent conduire à la même valeur de position de E_f . Les paramètres que nous avons retenus sont décrits dans les chapitres des résultats.

Des mesures de conductivité permettent d'estimer la position du niveau de Fermi dans le a-Si:H à partir de l'énergie d'activation. Les valeurs typiques mesurées dans l'équipe pour un a-Si:H dopé P est situé à 0.4 eV de la bande de valence et pour un dopage N à 0.2 eV de la bande de conduction [16, 17].

Une autre particularité du silicium amorphe est que son gap électrique (ou gap de mobilité) défini par:

$$E_\mu = E_c - E_v \quad (2.4)$$

est *a priori* légèrement supérieur au gap optique (1.7 eV [18]). En effet, une partie des queues de bande de valence et de conduction se situe dans les états étendus. Ces états localisés participent donc également à l'absorption des photons, ce qui réduit le gap optique de quelques centaines de meV par rapport au gap de mobilité. Mais dans le cadre des simulations effectuées dans cette thèse nous avons choisi d'utiliser la même valeur pour les gaps optique et de mobilité: $E_g = E_\mu = 1.7$ eV.

L'affinité électronique du a-Si:H peut être obtenue à partir de mesures de capacitance en fonction de la tension (mesures C-V). D'après la littérature elle varie dans la gamme 3.93 ± 0.07 eV [19].

Une fois les paramètres du a-Si:H connus, il est possible de modéliser le diagramme des bandes de l'hétérojonction avec le modèle d'Anderson décrit dans la section 2.1 et en déduire les propriétés de l'interface décrites dans la section suivante.

2.3 Zone d'inversion et canal de conduction à l'interface de l'hétérojonction

En observant le diagramme de bandes de l'hétérojonction obtenu avec le modèle d'Anderson on voit apparaître à l'interface côté c-Si une zone d'inversion représentée sur la Figure 2-3a pour un bulk de type N. Cette inversion a lieu lorsque le niveau de Fermi devient plus proche de la bande de

valence que de la bande de conduction ($E_f - E_v < E_c - E_f$) ; et inversement pour un bulk de type P lorsque $E_c - E_f < E_f - E_v$. Cela signifie que les porteurs qui sont minoritaires dans le bulk cristallin deviennent les porteurs majoritaires proche de l'interface. On parle même d'inversion forte lorsque l'écart $(E_f - E_v)^{int}$ (respectivement $(E_c - E_f)^{int}$ pour du (p)c-Si) devient inférieur à $(E_c - E_f)^{bulk}$ (respectivement $(E_f - E_v)^{bulk}$), i.e. la concentration de porteurs majoritaires à l'interface côté c-Si devient plus grande que la concentration de porteurs majoritaires du bulk (Figure 2-3b).

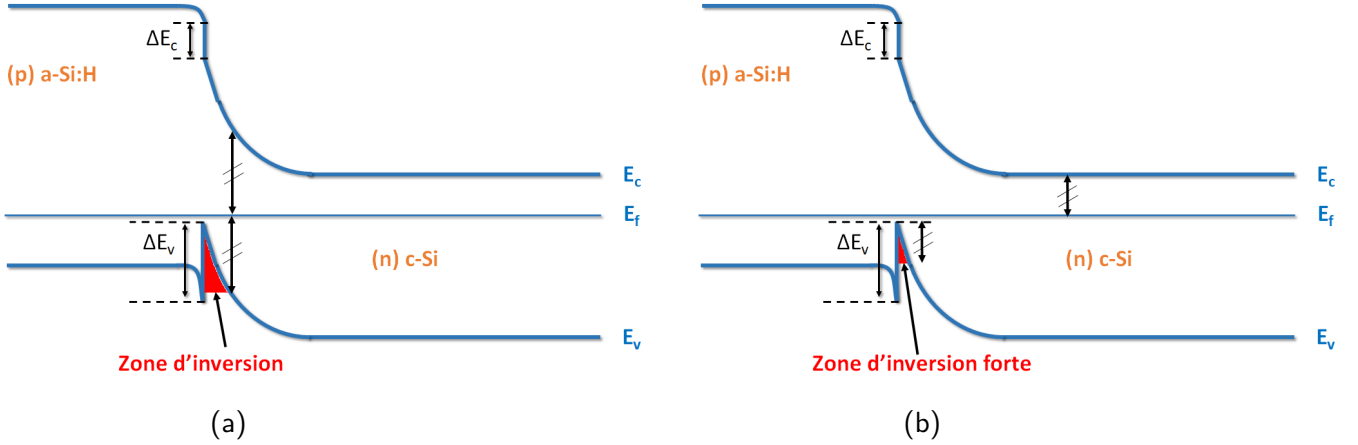


FIGURE 2-3 – Représentation de (a) la zone d'inversion, et (b) la zone d'inversion forte, sur le diagramme de bandes à l'équilibre de l'hétérojonction (p)a-Si:H/(n)c-Si.

Cet effet est dû à l'équilibrage des charges entre le a-Si:H et le c-Si. Compte tenu du nombre important de défauts et donc de charges fixes dans le a-Si:H dopé l'équilibrage se fait en quasi-totalité dans le c-Si. Il y a donc une accumulation soit de trous soit d'électrons à cet endroit créant ainsi un canal de conduction latéral important. Cette théorie a été validée expérimentalement au sein de notre laboratoire par des mesures de conductance planaire en température [16, 20]. Le premier type de mesure a permis de le déduire à partir de l'énergie d'activation mesurée. Le second type permet de directement observer l'existence d'un courant important à l'interface à partir de la cartographie en profondeur de l'échantillon. Les mesures de conductance planaire ont par la suite été utilisées pour caractériser la courbure de bandes du c-Si à l'interface ainsi que les valeurs des discontinuités de bandes (ΔE_c et ΔE_v) pour les deux types de structures (p/n et n/p) [21, 22, 23, 24]. Ainsi, sur une série d'échantillons provenant de plusieurs laboratoires les valeurs de ΔE_c et ΔE_v ont été estimées à 0.15 ± 0.07 eV et 0.36 ± 0.04 eV respectivement [23]. Ces valeurs sont en bon accord avec les résultats obtenus par d'autres groupes qui utilisent les techniques de Near-UV PhotoElectron Spectroscopy (NUV-PES) et Surface PhotoVoltage (SPV) [25, 26, 27].

Dans les cellules à hétérojonctions de silicium à haut rendement une fine couche passivante de

silicium amorphe intrinsèque (i)a-Si:H est ajoutée entre le c-Si et le a-Si:H dopé créant des cellules de types (n/i)a-Si:H/p-cSi et (p/i)a-Si:H/n-cSi dans l'objectif de réduire les recombinaisons à la surface du c-Si. De même que pour le a-Si:H dopé, l'épaisseur de cette couche est sujette à un compromis. En effet, elle doit rester fine pour limiter les pertes par absorption ainsi que sa résistivité qui nuirait au facteur de forme FF (voir Annexe D pour la définition), tout en étant suffisamment épaisse pour assurer une bonne passivation des défauts d'interface. Lorsque cette couche est incorporée dans l'hétérojonction, une partie de la chute de potentiel qui a initialement lieu dans le c-Si se retrouve dans le (i)a-Si:H. En effet ce dernier étant connu pour être moins défectueux que l'amorphe dopé, sa charge totale n'est pas suffisante pour s'équilibrer avec celle du a-Si:H dopé. Par conséquent la chute de potentiel dans le c-Si et donc la passivation par effet de champ diminue en présence de la couche passivante et d'autant plus que son épaisseur augmente car il absorbe une partie de plus en plus importante de la chute de potentiel. Cet effet a été mis en évidence expérimentalement par la technique de conductance planaire [28]. La réduction de l'épaisseur du (i)a-Si:H est donc également importante pour maintenir une passivation par effet de champ suffisante, critère jouant un rôle important dans les performances des cellules solaires.

Les spécificités de l'hétérojonction de silicium, i.e. la présence de discontinuités de bandes et d'une zone d'inversion, induisent des effets particuliers sur les caractéristiques courant-tension des cellules solaires fabriquées à base de cette technologie. Plusieurs auteurs ont donc proposé des modèles de mécanismes de conduction différents dans ce type de cellules. Nous les résumons dans la section qui suit.

2.4 Etat de l'art des modèles de mécanismes de conduction dans les cellules à hétérojonction a-Si:H/c-Si

La présence de discontinuités de bandes à l'interface a-Si:H/c-Si crée une barrière pour le passage des porteurs du c-Si vers le a-Si:H. Il se pose donc la question concernant les mécanismes de conduction dans ce type de structure. Dans son modèle de 1962, Anderson utilisa le principe de diffusion de Shockley. Mais d'autres modèles ont été proposés par la suite dans les années 60: l'émission thermoionique et son amplification par effet de champ [29] ainsi que différents modèles de transport par effet tunnel [30, 31, 32].

Une deuxième vague d'études sur les mécanismes de conduction dans ce type d'hétérojonctions

à partir des caractéristiques courant-tension a eu lieu dans les années 80 avec Smid *et al.* [33] qui proposèrent le modèle des courants limités par la charge d'espace (SCLC : Space Charge Limited Currents) mais n'étudièrent pas le régime des faibles polarisations. Pour ce régime de faibles polarisations Matsuura *et al.* proposèrent le modèle de MultiTunneling Capture-Emission (MTCE) [19, 34] alors que Salama *et al.* expliquèrent leur résultats par le transport thermoionique [35]. Brodsky *et al.*, eux, proposèrent le modèle de transport tunnel par saut, ou "hopping", [36].

Plus récemment, de nouvelles études basées sur les courbes de courant-tension expérimentales, différents modèles de mécanismes de conduction dans les cellules à hétérojonction a-Si:H/c-Si ont été proposés dans la littérature pour les deux types de dopage du silicium cristallin (n ou p) et selon la gamme de tensions appliquées. Il a également été remarqué que le principe de superposition entre les caractéristiques courant-tension à l'obscurité et sous lumière ne s'appliquait pas forcément [37]. Néanmoins, une tentative de corrélation entre les résultats à l'obscurité et sous lumière a été proposée par Chavali *et al.* [38]. Nous résumerons donc dans un premier temps les modèles de la littérature des mécanismes de conduction à l'obscurité, puis dans un deuxième temps les effets observés sous lumière ainsi que les conclusions de Chavali *et al.*

2.4.1 Mécanismes de transport à l'obscurité

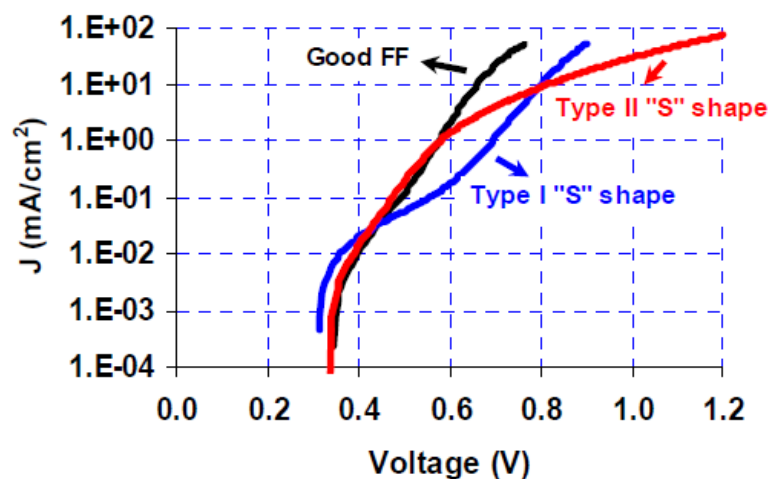


FIGURE 2-4 – Caractéristiques courant-tension typiques mesurées à l'obscurité par Das *et al.* [37] pour des hétérojonctions (p)a-Si:H/(n)c-Si.

La Figure 2-4 [37] représente un exemple de caractéristique courant-tension à l'obscurité d'une hétérojonction de (p)a-Si:H/(n)c-Si. On y observe trois régimes distincts en fonction de la gamme

de tensions appliquée et qui supposent trois mécanismes de conduction prédominants. Afin de déterminer la nature de chacun des mécanismes, la méthode utilisée par les auteurs consiste à étudier l'évolution de chaque régime avec la variation de la température. Concernant le régime des plus hautes tensions les auteurs s'accordent à l'associer à un mécanisme de diffusion en raison d'un courant limité par la charge d'espace et le régime de polarisation inverse à un mécanisme de génération/recombinaison dans la charge d'espace [39, 40, 41, 42].

En revanche, pour les polarisations plus faibles les mécanismes dominant la conduction semblent être dépendants des échantillons quelque soit la structure. Certains auteurs ont conclu que leurs résultats étaient compatibles avec le modèle de MultiTunneling Capture-Emission (MTCE) de Matsuura *et al.* [42, 43, 44, 45] mais d'autres auteurs ont déduit que c'est un mécanisme de recombinaison qui limitait le courant: soit dans la zone de charge d'espace [39, 42] soit dans le bulk cristallin [46]. D'autres conclurent que les deux types de mécanismes (MTCE et recombinaisons) limitaient le courant de leurs cellules et que l'un ou l'autre prédominait soit à très faible soit à moyenne polarisation [41, 47].

Ces différents mécanismes de conduction à travers l'hétérojonction sont résumés dans la Figure 2-5.

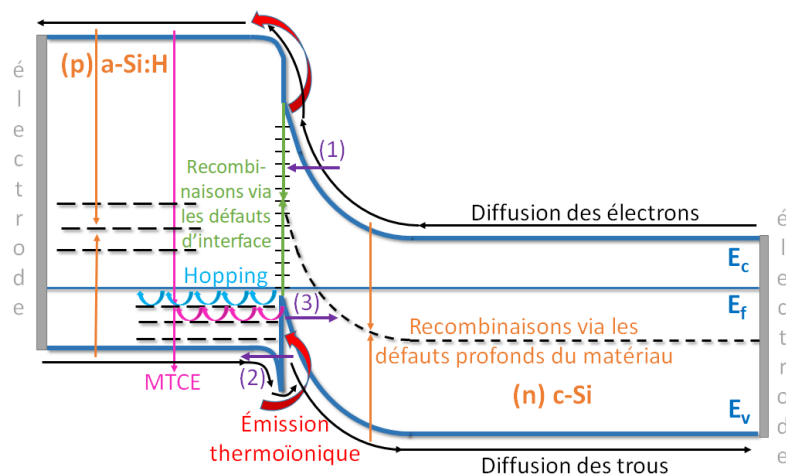


FIGURE 2-5 – Représentation schématique des mécanismes de transport pouvant avoir lieu dans une cellule à hétérojonction (p)a-Si:H/(n)c-Si. (1) Transport tunnel des électrons vers les états d'interface où ils se recombinent. (2) Transport tunnel des trous à travers la barrière de potentiel à l'interface. (3) Transport tunnel des trous vers les défauts profonds du c-Si où ils se recombinent.

Das *et al.* [37] effectuèrent une étude sur l'impact des conditions de dépôt de l'a-Si:H sur les caractéristiques courant-tension des cellules à l'obscurité et sous lumière. Ils recensèrent ainsi trois

catégories de caractéristiques $I(V)$ selon leur comportement en fonction de la polarisation. Cela montre que les caractéristiques du silicium amorphe ont une influence importante sur les mécanismes de conduction dans ces cellules et explique l'origine des différences entre les résultats des différents auteurs.

Voyons à présent comment sont impactés ces mécanismes de conduction par la présence de la couche de passivation (i)a-Si:H. Plusieurs auteurs confirmèrent la domination du mécanisme MTCE aux faibles polarisations [42, 44, 47, 48] mais certains d'entre eux ont également remarqué une diminution du courant régi par ce mécanisme par rapport à la structure en absence de (i)a-Si:H [42] ou qu'il était faible comparé au courant de court-circuit J_{sc} (voir Annexe D pour la définition) [48]. Ils ont alors conclu que le transport par MTCE n'affectait pas les performances de leurs cellules et que la couche de silicium amorphe intrinsèque supprime la probabilité de conduction par effet tunnel en raison d'une moindre quantité de défauts que dans l'amorphe dopé. Cette disparition de l'effet tunnel a également été remarquée par Mikolasek *et al.* lorsque l'épaisseur de la couche (i)a-Si:H atteignait les 10 nm [44], et par Page *et al.* qui ont montré que le transport à travers la couche de (i)a-Si:H était plus vraisemblablement dû au champ électrique et ont proposé la conduction par "hopping" [49].

Nous avons vu dans cette partie que les mécanismes de conduction dominants à l'obscurité dépendent de deux paramètres: la tension de polarisation et le type de structure (paramètres du silicium amorphe, présence ou non de (i)a-Si:H). Voyons à présent ce qu'il se passe sous éclaircissement.

2.4.2 Mécanismes de transport sous lumière

Van Cleef *et al.* [50] ainsi que Kanevce *et al.* [51] ont effectué des simulations afin d'étudier l'importance du mécanisme de transport par effet tunnel dans les cellules HIT avec des substrats de silicium cristallin de type N. Ils affirmèrent que ce mécanisme était nécessaire afin d'obtenir les hautes valeurs de facteur de forme (FF) et des efficacités de cellules supérieures à 20%. Cependant Rahmouni *et al.* [52] réussirent à modéliser les performances de cellules de Sanyo sans prendre en compte l'effet tunnel. Ils montrèrent dans leur étude que ce dernier était négligeable sous un éclaircissement AM1.5 et que les porteurs pouvaient passer la barrière de potentiel à l'interface a-Si:H/c-Si par émission thermoionique. Ils ont donc également fait l'hypothèse que la couche passivante de (i)a-Si:H permettait de supprimer le mécanisme de MTCE. D'autre part, Mews *et al.* [53] réalisèrent une étude en mettant à la place du (i)a-Si:H du (i)a-SiOx:H dont la teneur en oxygène permet de

faire varier la valeur de ΔE_v . Ils en déduisirent que l'augmentation de la discontinuité de la bande de valence engendrait une hausse du transport par "hopping" à travers les états de la queue de bande de valence et réduisait la contribution du transport thermoïonique. Nous pouvons en conclure, étant donné la valeur du gap du a-Si:H, que la barrière à l'interface est suffisamment faible pour que les trous puissent la franchir par émission thermoïonique et que les mécanismes de tunnel sont en effet négligeables.

Plus récemment, Ghosh *et al.* [54] étudièrent le rôle des porteurs chauds dans le transport au niveau de l'interface a-Si:H/c-Si en développant un modèle Monte-Carlo permettant d'inclure l'influence du fort champ électrique présent dans la région d'inversion. Ils conclurent que la quantité de porteurs photogénérés collectés augmente avec l'augmentation du champ électrique car celui-ci favorise la présence à l'interface de porteurs ayant une énergie d'excitation élevée et augmente ainsi leur probabilité de transmission.

2.4.3 Forme des courbes $I(V)$ à l'obscurité et sous lumière

Suite aux différences de comportement du courant d'obscurité observé par Das *et al.* des cellules HIT élaborées avec différentes méthodes de dépôt du silicium amorphe [37], Chavali *et al.* proposèrent une explication à la courbe $I(V)$ en forme de S apparaissant pour certains types d'échantillons. Pour cela ils ont effectué des simulations des diagrammes de bandes pour différents régimes de polarisation. Ils conclurent que la zone d'inversion à l'interface commence à disparaître pour les fortes polarisations ce qui induit une répartition de la chute de potentiel entre le (p)a-Si:H et le (n)c-Si, le courant est alors dominé par le type de porteurs dont la barrière à franchir est la plus faible. Pour les échantillons présentant une caractéristique $I(V)$ en forme de S ce courant initialement limité par la concentration de trous à l'interface devient limité par la diffusion des électrons du c-Si vers le a-Si:H. C'est donc ce changement de type de porteurs dominant le courant qui résulte en une caractéristique courant-tension en forme de S [38].

Das *et al.* remarquèrent également que le principe de superposition des courbes $I(V)$ à l'obscurité et sous éclairage ne s'appliquait pas à toutes les catégories de cellules qu'ils ont caractérisé [37]. Pour expliquer ces résultats sous lumière Chavali *et al.* ont recouru aux simulations numériques en séparant la contribution au courant total du courant d'injection (dû à la polarisation de la cellule) et du photocourant (dépendant de la photogénération) [38]. Les simulations de ces courants ont été réalisées pour deux densités de dopage du (p)a-Si:H: faible dopage et fort dopage, afin de

conclure sur le lien entre les propriétés du a-Si:H et les caractéristiques courant-tension. Ils ont ainsi déduit que le principe de superposition ne s'applique pas lorsque le a-Si:H est faiblement dopé en remarquant que la tension pour laquelle ΔE_v joue le rôle d'une barrière importante pour la collecte des porteurs photogénérés est plus faible que le V_{oc} . Dans le cas d'un plus fort dopage, cette tension est supérieure au V_{oc} et le principe de superposition s'applique [38]. Ils expliquent ce résultat par le fait que pour un silicium amorphe plus fortement dopé, la charge y est suffisamment élevée pour compenser la charge supplémentaire engendrée par les porteurs photogénérés et donc que la chute de potentiel à l'interface n'est que légèrement modifiée par rapport à l'obscurité.

La forme de la courbe $I(V)$ dépend donc du diagramme de bandes à l'équilibre de l'hétérojonction. Or celle-ci dépend des propriétés du a-Si:H et donc des conditions de dépôt. Il est également évident que la présence de la couche (i)a-Si:H et ses propriétés (épaisseur et densité de défauts) ont une influence sur le diagramme de bandes et donc sur les mécanismes de conduction à l'oeuvre.

Nous avons vu dans cette section que le courant extrait d'une cellule solaire constituée de l'hétérojonction (a)Si:H/c-Si pouvait être limité par des mécanismes de recombinaison des porteurs libres ou de transport par effet tunnel assisté par défauts et notamment au niveau de l'interface entre le silicium amorphe et le silicium cristallin.

Notons dès à présent que contrairement aux études décrites dans cette partie, les mesures électriques dans le cadre de cette thèse seront effectuées avec des électrodes en configuration coplanaire. Le transport des charges sera donc majoritairement latéral (Figure 2-6), parallèle à l'interface, en raison de l'existence du canal de conduction créé par l'hétérojonction. Nos mesures électriques seront alors plus sensibles aux phénomènes physiques ayant lieu à l'hétérojonction et la connaissance des différents mécanismes de transports pouvant avoir lieu à l'interface est donc d'autant plus importante.

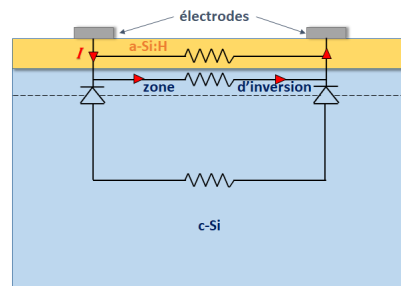


FIGURE 2-6 – Représentation schématique du circuit électrique simplifié de l'hétérojonction a-Si:H/c-Si. Le courant circule dans le canal de conduction créé par la zone d'inversion à l'interface.

Dans la section qui suit nous résumons les différents mécanismes de recombinaison qui peuvent avoir lieu dans ce type de cellules ainsi que le type de défauts présents à l'interface a-Si:H/c-Si.

2.5 Mécanismes de recombinaison et durée de vie des porteurs

Dans un premier temps nous rappellerons les mécanismes de recombinaison standards qui ont lieu dans le volume des matériaux semiconducteurs, puis nous nous intéresserons aux mécanismes de recombinaisons propres à l'interface et aux défauts présents à l'hétérojonction a-Si:H/c-Si. Pour finir nous aborderons la notion de durée de vie effective.

2.5.1 Mécanismes de recombinaison en volume des matériaux semiconducteurs

Trois types de recombinaisons entre un électron de la bande de conduction et un trou de la bande de valence peuvent avoir lieu dans le volume des matériaux semiconducteurs: radiative, Auger et Shockley-Read-Hall.

2.5.1.1 Recombinaisons radiatives

On parle de recombinaison radiative lorsque un électron de la bande de conduction se désexcite en émettant un photon pour se recombiner directement avec un trou de la bande de valence (Figure 2-7).

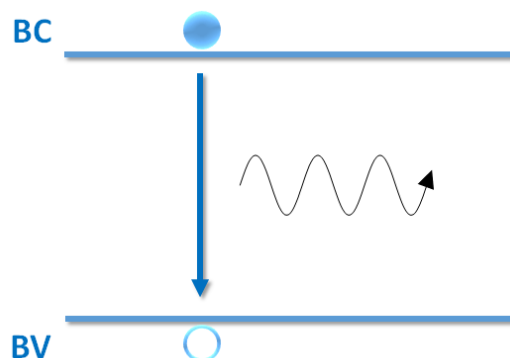


FIGURE 2-7 – Représentation schématique de la recombinaison radiative.

Le taux de recombinaison radiatif s'exprime:

$$R_{rad} = Bnp \quad (2.5)$$

où n est la concentration d'électrons dans la bande de conduction, p est la concentration de trous dans la bande de valence, et B un coefficient dépendant du matériau. Ce type de recombinaison est peu fréquent dans le silicium cristallin où $B = 9.5 \times 10^{-15} \text{ cm}^3.\text{s}^{-1}$ [55] en raison de son gap indirect.

2.5.1.2 Recombinaisons Auger

La recombinaison Auger correspond également à une transition directe d'un électron de la bande de conduction vers la bande de valence où il se recombine avec un trou mais dans ce cas il se désexcite en transférant son surplus d'énergie soit à un autre électron de la bande de conduction (Figure 2-8a), soit à un autre trou de la bande de valence (Figure 2-8b).

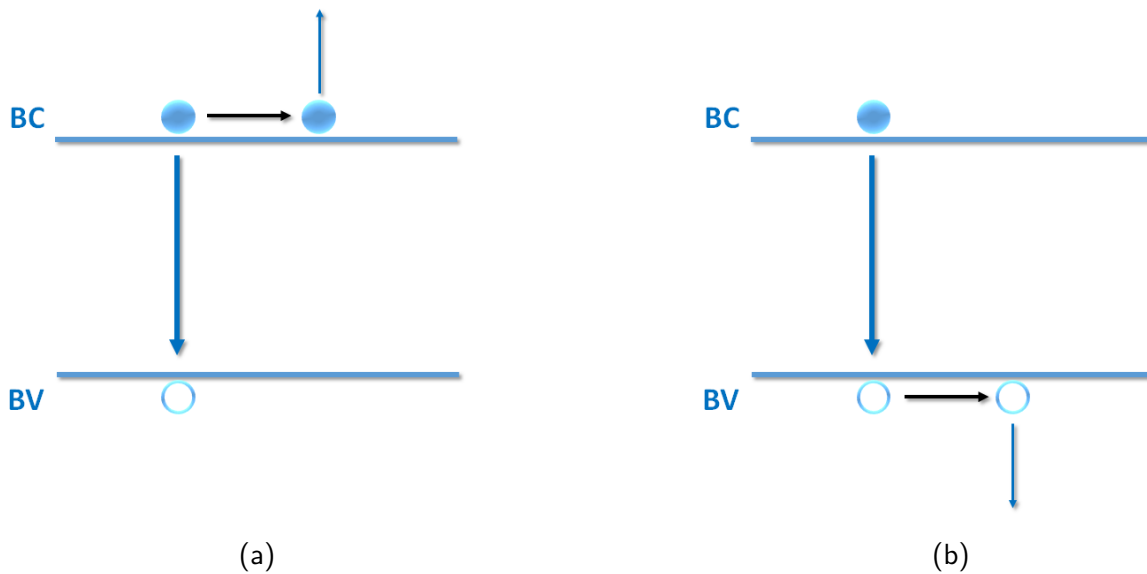


FIGURE 2-8 – Représentation schématique de la recombinaison Auger avec transmission d'énergie à (a) un électron de la BC qui monte alors en énergie, (b) un trou de la BV qui descend en énergie. Les flèches bleues représentent les variations d'énergie d'un porteur. Les flèches noires représentent les transferts d'énergie entre deux porteurs.

Ce processus impliquant trois particules complique la mise en équation de la recombinaison Auger, c'est pourquoi les modèles proposés dans la littérature sont basés sur une paramétrisation des coefficients Auger à partir des mesures de durée de vie. L'expression la plus actuelle à 300K et valide pour une large gamme de dopages et de conditions d'injection est celle de Richter *et al.* [56]

qui ont amélioré le modèle précédent de Kerr et Cuevas [57]:

$$R_{Aug} = (np - n_i^2)(2.5 \times 10^{-31} g_{eeh} n_0 + 8.5 \times 10^{-32} g_{ehh} p_0 + 3.0 \times 10^{-29} \Delta n^{0.92}) \quad (2.6)$$

où n et p sont les concentrations d'électrons et de trous respectivement dans la bande de conduction et la bande de valence, n_0 et p_0 sont leurs concentrations à l'équilibre, $n_i^2 = n_0 p_0$, Δn est la concentration de porteurs en excès, et g_{eeh} , g_{ehh} sont des facteurs permettant de prendre en compte l'augmentation du taux de recombinaison Auger par effet Coulomb et paramétrés tels que:

$$g_{eeh} = 1 + 13 \left\{ 1 - \tanh \left[\left(\frac{n_0}{3.3 \times 10^{17}} \right)^{0.66} \right] \right\} \quad (2.7)$$

$$g_{ehh} = 1 + 7.5 \left\{ 1 - \tanh \left[\left(\frac{p_0}{7 \times 10^{17}} \right)^{0.63} \right] \right\} \quad (2.8)$$

Ce type de recombinaison est peu fréquent dans le c-Si faiblement dopé et dans les conditions de faible injection mais devient important pour les forts dopages et à forte injection.

2.5.1.3 Recombinaisons Shockley-Read-Hall (SRH)

Contrairement aux recombinaisons radiatives et Auger, celles de type Shockley-Read-Hall (SRH) correspondent à des recombinaisons où les porteurs de charge transitent par un état dans le gap du semiconducteur. Cela est possible en raison de la présence de défauts qui peuvent capturer et ré-émettre des porteurs et agissent donc comme des centres recombinants. La Figure 2-9 schématise les différentes transitions possibles par un défaut situé dans le gap à une énergie E_t .

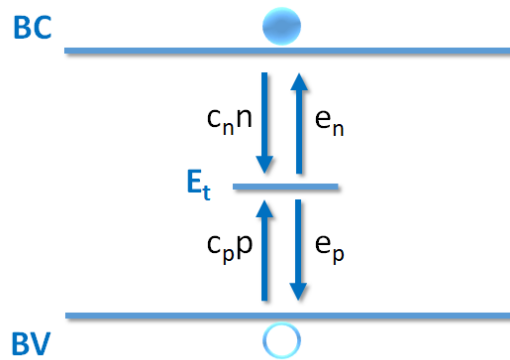


FIGURE 2-9 – Représentation schématique de la recombinaison SRH.

Chaque transition est caractérisée par une fréquence de capture ($c_n n$, $c_p p$) ou d'émission (e_n , e_p). c_n et c_p sont les coefficients de capture des électrons et des trous. Ils correspondent au produit de la vitesse thermique des porteurs avec leur section efficace de capture par le défaut ($c = v_{th}\sigma$). n et p sont les concentrations d'électrons et de trous respectivement dans la bande de conduction et la bande de valence.

Le taux de recombinaison pour chaque type de charge (r_n et r_p) correspond à la différence entre le taux de capture et le taux d'émission:

$$r_n = c_n n N_{tV} - e_n N_{tO} \quad (2.9)$$

$$r_p = c_p p N_{tO} - e_p N_{tV} \quad (2.10)$$

où N_{tV} et N_{tO} sont respectivement le nombre de centres recombinants vides et occupés, et qui dépendent de l'énergie E_t et de la température par la fonction d'occupation f_r :

$$f_r = \frac{1}{1 + e^{\frac{E_t - E_f}{kT}}} \quad (2.11)$$

où E_f est l'énergie du niveau de Fermi et k la constante de Boltzmann. Ainsi $N_{tO} = N_t f_r$ et $N_{tV} = N_t (1 - f_r)$ avec N_t le nombre de centres recombinants.

Lors de la recombinaison d'une paire électron trou $r_n = r_p$ et le taux de recombinaison SRH s'exprime:

$$R_{SRH} = c_n c_p N_t \frac{np - n_i^2}{c_n (n + n_i e^{\frac{E_f - E_t}{kT}}) + c_p (p + n_i e^{\frac{E_t - E_f}{kT}})} \quad (2.12)$$

On peut le réexprimer comme suit en considérant que les électrons et les trous ont la même vitesse thermique, ce qui est vrai dans le cas du silicium cristallin:

$$R_{SRH} = v_{th} N_t \frac{np - n_i^2}{\frac{1}{\sigma_p} (n + n_i e^{\frac{E_f - E_t}{kT}}) + \frac{1}{\sigma_n} (p + n_i e^{\frac{E_t - E_f}{kT}})} \quad (2.13)$$

où $n_i^2 = n_0 p_0$ avec n_0 et p_0 les concentrations d'électrons et de trous à l'équilibre. La recombinaison SRH domine dans le a-Si:H en raison du nombre important de défauts et donc de centres recombinants qui s'y trouvent. Elle domine également dans le c-Si faiblement dopé et à faible injec-

tion.

2.5.2 Recombinaisons d'interface et types de défauts à l'hétérojonction de silicium

Les recombinaisons à la surface d'un semiconducteur ou à l'interface entre deux matériaux limitent les performances des cellules solaires dans le cas de matériaux suffisamment purs tel que le silicium cristallin. Elles sont dues à la présence de défauts liées aux liaisons pendantes non satisfaites et aux impuretés. Ces recombinaisons s'expriment d'une manière similaire à la recombinaison SRH par la relation 2.14 en fonction de la vitesse de recombinaison de surface telle que $S = v_{th}\sigma N_{tS}$ où N_{tS} est la concentration surfacique de défauts.

$$R_{surf} = \frac{n_s p_s - n_i^2}{\frac{1}{S_p}(n_s + n_i e^{\frac{E_f - E_t}{kT}}) + \frac{1}{S_n}(p_s + n_i e^{\frac{E_t - E_f}{kT}})} \quad (2.14)$$

n_s et p_s sont les concentrations surfaciques d'électrons et de trous.

Afin de réduire ce type de recombinaisons on utilise couramment la passivation. Dans le cas de l'hétérojonction a-Si:H/c-Si, le a-Si:H dopé introduit une grande quantité de charges fixes ce qui permet de diminuer la concentration d'un type de porteurs à l'interface côté c-Si par effet de champ. Cependant le nombre de liaisons insatisfaites reste conséquent. Pour y remédier on ajoute une couche de silicium amorphe intrinsèque qui a pour effet de réduire le nombre de défauts et donc de recombinaisons d'interface. Comme nous l'avons déjà vu, une réduction optimale de ce taux de recombinaison résulte de la combinaison subtile entre qualité de passivation par effet de champ et réduction des liaisons insatisfaites.

Nous savons modéliser les défauts du silicium cristallin (défaut situé au midgap et coefficient de capture déterminé à partir de la durée de vie des porteurs minoritaires) ainsi que ceux du silicium amorphe grâce au modèle Defect-Pool, intéressons nous à présent aux défauts d'interface.

Il a été montré dans la littérature que les recombinaisons d'interface proviennent de deux types de défauts: les liaisons pendantes à la surface du c-Si appelés centres de recombinaisons P_{b0} , et les défauts profonds du a-Si:H appelés centres de recombinaisons D [58, 59, 60].

2.5.3 Durée de vie effective

La durée de vie (τ) d'un porteur est définie comme le rapport de la densité de porteurs minoritaires en excès (Δn ou Δp) sur leur taux de recombinaison (R). Prenons l'exemple du silicium cristallin dopé N où les porteurs minoritaires sont les trous:

$$\tau = \frac{\Delta p}{R} \quad (2.15)$$

Or, comme nous l'avons vu dans les sections précédentes ces porteurs peuvent se recombiner par différents mécanismes que ce soit dans le volume des matériaux (bulk) ou à leur surfaces. Tous ces taux de recombinaisons s'ajoutent pour donner un taux de recombinaison effectif:

$$R^{eff} = R_{bulk} + R_{surf} = R_{rad} + R_{Aug} + R_{SRH} + R_{surf,FAV} + R_{surf,FAR} \quad (2.16)$$

(FAV: face avant, FAR: face arrière)

Il en résulte donc une durée de vie effective (moyennée sur le volume du matériau) telle que:

$$\frac{1}{\tau^{eff}} = \frac{R^{eff}}{\Delta p} = \frac{1}{\tau_{rad}} + \frac{1}{\tau_{Aug}} + \frac{1}{\tau_{SRH}} + \frac{1}{\tau_{surf,FAV}} + \frac{1}{\tau_{surf,FAR}} \quad (2.17)$$

Lorsque les conditions aux surfaces sont identiques de part et d'autre du matériau, comme c'est le cas pour les hétérojonctions symétriques que nous étudions dans cette thèse, la durée de vie effective peut se ré-écrire:

$$\frac{1}{\tau^{eff}} = \frac{1}{\tau_{bulk}} + \frac{2}{\tau_{surf}} \quad (2.18)$$

Si de plus la vitesse de recombinaison de surface est faible [61]:

$$\frac{1}{\tau^{eff}} = \frac{1}{\tau_{bulk}} + \frac{2S}{d} \quad (2.19)$$

où S est la vitesse de recombinaison surfacique et d l'épaisseur du matériau .

Lorsqu'un mécanisme de recombinaison est majoritaire, il limite la durée de vie effective. Par conséquent, sa mesure permet dans certains cas d'évaluer la densité de défauts à l'origine de cette recombinaison.

Différents types de mesures permettent d'estimer la durée de vie effective dans les matériaux

semiconducteurs [57, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69]. Dans le cadre de cette thèse nous utiliserons les techniques disponibles au laboratoire, à savoir la PhotoLuminescence Modulée (MPL) [70] et le Déclin de PhotoConductance (PCD ou Sinton) [71, 72].

Chapitre 3

Description des méthodes expérimentales et des méthodes de simulation

Dans cette partie sont présentées trois techniques expérimentales existantes au laboratoire et utilisées dans le cadre des travaux de cette thèse:

- La mesure de conductivité: dans le cas de l'hétérojonction elle permet de mesurer la courbure des bandes à l'interface et la valeur de la discontinuité de bande de conduction dans le cas d'un substrat dopé P ou de valence pour un substrat dopé N.

- La mesure de PhotoLuminescence Modulée (MPL): utilisée pour évaluer la durée de vie effective des porteurs libres dans le silicium cristallin passivé et les hétérojonctions de silicium.

- La mesure du PhotoCourant Modulé (MPC): permet d'estimer la densité d'états de défauts, ou DOS (Density Of States), dans les matériaux présentant une distribution énergétique continue de défauts dans le gap tel que le silicium amorphe hydrogéné. Dans le cadre de cette thèse elle sera pour la première fois appliquée au cas des hétérojonctions de silicium.

L'analyse et l'interprétation des résultats expérimentaux nécessite souvent de recourir aux simulations numériques. Dans le cadre de cette thèse nous avons choisi d'utiliser le logiciel commercial ATLAS de Silvaco. Ce chapitre comporte donc également une description de son principe de fonctionnement.

3.1 Principe de la mesure de conductivité

3.1.1 Dans le cas d'une couche mince

Par définition, la conductivité d'un matériau correspond à la densité de courant $\vec{J}$ qui passe dans une section S de ce matériau pour un champ électrique appliqué $\vec{\xi}$ donné:

$$\vec{J} = \sigma \vec{\xi} \quad (3.1)$$

Les mesures de conductivité sont largement utilisées pour caractériser les couches minces semi-conductrices. La mesure consiste à appliquer une tension V entre deux électrodes coplanaires déposées sur le matériau et espacées d'une distance L , puis on mesure le courant I à l'aide d'un ampère-mètre (Figure 3-1). La conductivité ($\Omega^{-1}.cm^{-1}$) de la couche s'exprime alors comme:

$$\sigma = \frac{J}{\xi} = \frac{I L}{S V} \quad (3.2)$$

où S est la section dans laquelle passe le courant et s'exprime par:

$$S = H \times d \quad (3.3)$$

où H est la longueur des électrodes et d l'épaisseur de la couche semiconductrice.

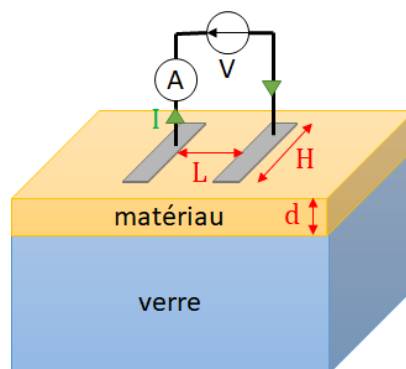


FIGURE 3-1 – Représentation schématique de la mesure de conductivité.

Notons que la conductivité peut également s'exprimer en fonction du nombre de porteurs à l'équilibre (n_0 pour les électrons et p_0 pour les trous) et de leur mobilités (μ_n et μ_p) par la relation suivante:

$$\sigma = qn_0\mu_n + qp_0\mu_p \quad (3.4)$$

Les mesures en température permettent d'estimer l'énergie d'activation de la conductivité du matériau dans le cas où le transport des charges se fait dans les états étendus, i.e. les électrons circulent dans la bande de conduction et les trous dans la bande de valence, et le transport par saut n'est pas considéré. Dans ce cas, la conductivité suit la loi d'Arrhénius telle que [73]:

$$\sigma(T) = \sigma_{00} \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right) \quad (3.5)$$

où $\sigma_{00} = qN(E_c)\mu_n kT \exp(\frac{\gamma}{k})$ si les électrons sont les porteurs majoritaires, si ce sont les trous alors $\sigma_{00} = qN(E_v)\mu_p kT \exp(\frac{\gamma}{k})$; q est la charge d'un électron, $N(E_c)$ et $N(E_v)$ sont les densités d'états effectives dans les bandes de conduction et de valence respectivement, μ_n et μ_p sont les mobilités des électrons et des trous, k est la constante de Boltzmann, T est la température, et γ est un coefficient tel que: $E_c - E_f = E_a - \gamma T$ ou $E_f - E_v = E_a - \gamma T$ respectivement. La mesure de conductivité nous donne par conséquent l'écart entre le niveau de Fermi et la bande de mobilité pour $T = 0$ K. Si le coefficient γ est suffisamment faible, comme c'est le cas pour le silicium amorphe hydrogéné où $\gamma \approx 10^{-4}$ eV/K [74], les valeurs à 300 K et à 0 K diffèrent de moins d'une centaine de meV. Par ailleurs, σ_{00} dépend peu de la température car la mobilité varie en $\frac{1}{T}$. Il est donc possible d'estimer à partir de la mesure de conductivité à l'obscurité, l'écart $E_c - E_f$ dans un matériau dopé N (ou $E_f - E_v$ dans un matériau dopé P) et donc le dopage du semiconducteur.

L'équation 3.5 est valable dans le cas d'une mesure sur couche mince seule, mais dans le cas de l'hétérojonction de silicium l'épaisseur d dans laquelle circule le courant n'est *a priori* pas connue en raison de la présence d'une zone d'inversion. La technique de mesure du courant coplanaire d'obscurité permet en fait de déterminer d'autres caractéristiques de l'hétérojonction : la courbure des bandes à l'interface et la valeur des discontinuités de bandes de conduction et de valence. Le principe de cette mesure est décrit dans la section suivante.

3.1.2 Dans le cas d'une hétérojonction

Comme décrit dans le chapitre 2, la courbure des bandes dans le silicium cristallin proche de l'interface dépend des discontinuités de bandes (ΔE_c et ΔE_v) et de la charge dans le matériau

amorphe. Étant donné la zone d'inversion créée par l'hétérojonction à l'interface, la conduction à l'obscurité entre les deux électrodes en configuration coplanaire se fait exclusivement dans ce canal [16] (Figure 3-2).

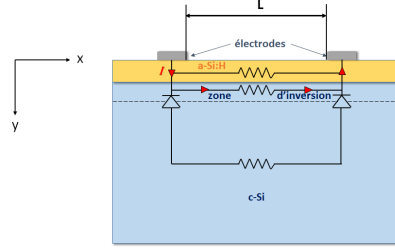


FIGURE 3-2 – Représentation schématique du circuit électrique simplifié de l'hétérojonction a-Si:H/c-Si. Le courant circule dans le canal de conduction latéral créé par la zone d'inversion à l'interface et verticalement sous les électrodes.

Contrairement au cas des mesures de conductivité sur une couche mince (où la surface de conduction, S , correspond au produit entre la longueur des électrodes et l'épaisseur du matériau), l'épaisseur du canal de conduction dans le cas d'une hétérojonction n'est pas connue. Par conséquent on parle plutôt en terme de conductance G (Ω^{-1}) qui s'exprime comme suit [28]:

$$G = P_s \frac{qL\mu_{mino}}{H} \quad (3.6)$$

où L est la distance entre les électrodes, H la longueur des électrodes, μ_{mino} la mobilité, et P_s (cm^{-2}) la densité surfacique de porteurs minoritaires, ou "carrier sheet density" en anglais, et qui s'exprime également:

$$P_s = \int_0^{d_{bulk}} (mino(x) - mino^{bulk}) dx \quad (3.7)$$

où $mino(x)$ et $mino^{bulk}$ sont respectivement les densités de porteurs minoritaires à la profondeur x et dans le bulk du matériau loin de l'interface où $mino$ ne varie plus avec x , d_{bulk} est l'épaisseur du bulk.

Un calcul analytique [23] ou des simulations numériques 1D, permettent de calculer la loi de variation de P_s en fonction de la courbure des bandes à l'interface (φ_{c-Si} , Figure 3-3b), dont un exemple est représenté sur la Figure 3-3a.

Puis, à partir de la mesure de conductance et de la relation 3.6, on détermine la valeur expérimentale de P_s . Il suffit alors de faire la concordance entre cette valeur et la courbure des bandes

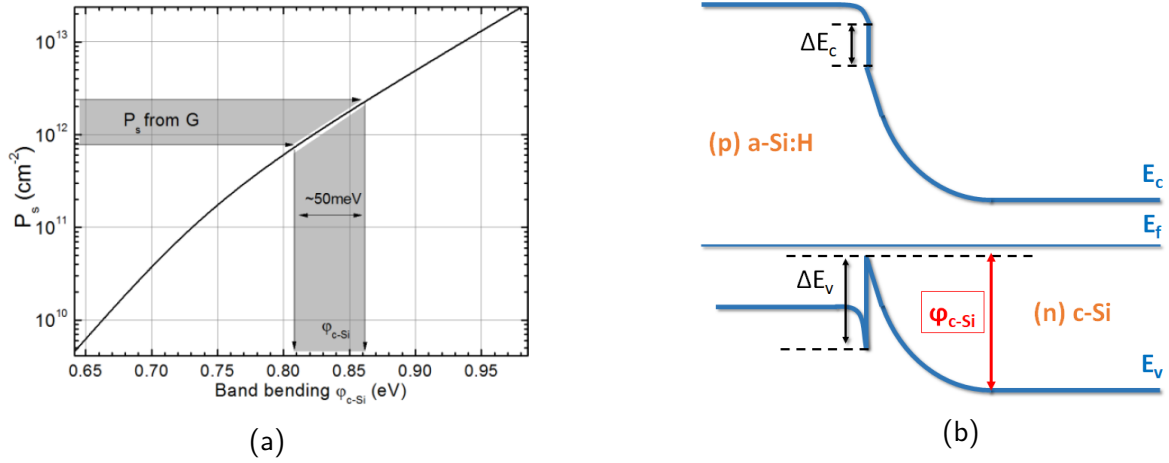


FIGURE 3-3 – Évolution théorique de la densité surfacique de porteurs P_s en fonction de la valeur de courbure de bandes à l'interface φ_{c-Si} représentée en (b), et exemple d'extraction de φ_{c-Si} dans un échantillon de (p)a-Si:H/(n)c-Si à partir de la mesure de conductance planeaire G [23].

associée. Il existe néanmoins une incertitude sur la valeur de mobilité (μ_{mino}) en raison d'une variation de la concentration de porteurs à l'interface et d'autres effets liés à la présence d'une zone d'inversion comme l'augmentation de la diffusion de surface (due à la rugosité de l'interface et des effets coulombiens liés à une densité élevée de charges d'interface), ainsi que l'existence d'un champ électrique créé par la courbure de bandes. Il en résulte donc une incertitude sur la valeur de P_s expérimentale et donc la valeur de la courbure de bandes. L'exemple de la Figure 3-3a, où les porteurs minoritaires dans le bulk sont les trous, montre que cette incertitude est d'environ 50 meV pour une erreur d'un facteur trois sur la mobilité des trous, i.e. qui passerait de $480 \text{ cm}^2.V^{-1}.s^{-1}$ (valeur typique dans le bulk) à $160 \text{ cm}^2.V^{-1}.s^{-1}$ (valeur réaliste pour une zone d'inversion forte).

Dans le cadre de cette thèse, nous réaliserons des simulations numériques 2D pour estimer la courbure des bandes à l'interface de nos échantillons. Ces simulations sont plus réalistes que celles à 1D étant donné que le courant doit traverser le silicium amorphe avant d'être collecté. Par conséquent le chemin de conduction n'est pas uniquement latéral (le long du canal de conduction) mais une partie de ce chemin est vertical (Figure 3-2). Cependant, nous verrons que le modèle analytique 1D reste valide pour les résultats à l'obscurité.

Les mesures en température, quant à elles, permettent de déterminer les discontinuités de bandes ΔE_c et ΔE_v à partir de l'énergie d'activation de la conductance E_a obtenue sur le diagramme d'Arrhenius¹. En effet, il a été montré que pour le cas des hétérojonctions (n)a-Si:H/(p)c-Si, la

1. La conductance (G) ou la densité surfacique de porteurs (P_s) peut s'exprimer en fonction de la température d'une manière équivalente à celle de la conductivité dans le cas d'une couche mince (équation 3.5). Le tracé de G (ou de P_s)

valeur de E_a correspond à l'écart $E_c - E_f$ à l'interface [21]. En effectuant une simulation numérique 1D, il est possible de calculer la dépendance de E_a avec ΔE_c . Puis, de manière similaire à la détermination de la courbure des bandes à partir de la conductance expérimentale, il suffit de faire concorder l'énergie d'activation de la conductance issue du diagramme d'Arrhenius expérimental avec la valeur de ΔE_c théorique (exemple sur la Figure 3-4a). Plus la valeur de ces discontinuités est grande, plus il peut y avoir de porteurs libres accumulés près de l'interface. Il en résulte alors une conductance plus élevée et un écart $E_c - E_f$ plus petit. La valeur de ΔE_c ainsi obtenue pour une série d'échantillons est de 0.15 ± 0.04 eV, et est en accord avec d'autres mesures effectués par spectroscopie de photoémission [25].

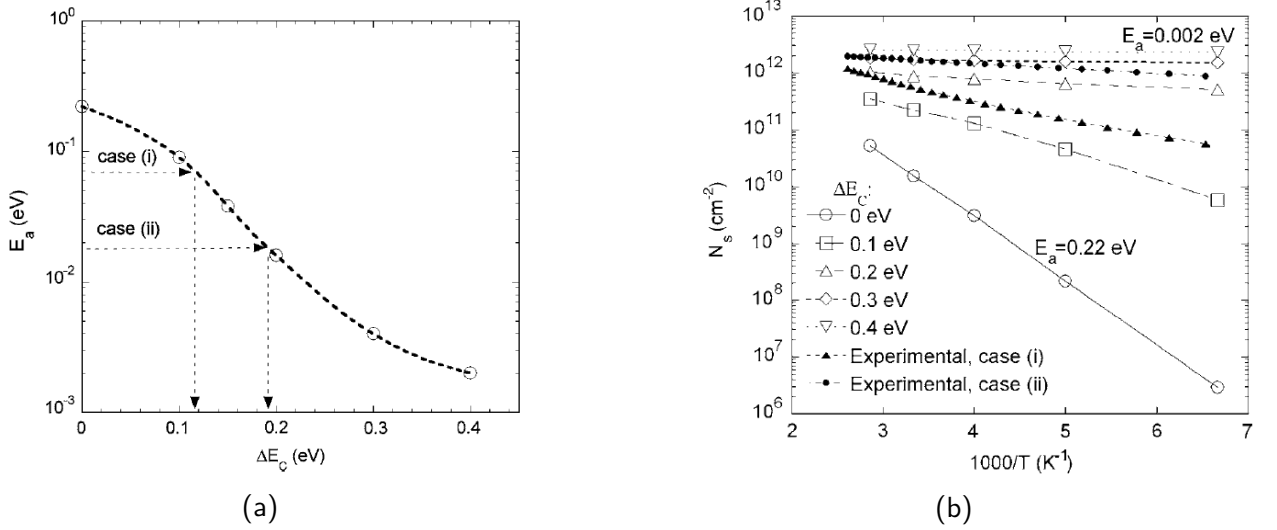


FIGURE 3-4 – (a) Évolution théorique de l'énergie d'activation E_a en fonction de la valeur de la discontinuité de la bande de conduction ΔE_c , et exemple d'extraction de ΔE_c dans un échantillon de (n)a-Si:H/(p)c-Si à partir de la mesure de E_a sur le diagramme d'Arrhenius représenté en (b). Les deux cas expérimentaux correspondent à la même conductance mais dont la densité surfacique d'électrons N_s est extraite selon la relation 3.6 pour deux cas extrêmes de variation de la mobilité avec la température [21].

On peut voir sur la Figure 3-4b que la détermination de l'énergie d'activation pour une hétérojonction (n)a-Si:H/(p)c-Si peut se faire pour un nombre élevé de points expérimentaux qui représentent une droite pour une large gamme de températures sur le diagramme d'Arrhenius. En revanche, pour la structure inverse, (p)a-Si:H/(n)c-Si, cette droite n'est pas bien définie [24]. Il est alors difficile d'utiliser cette méthode afin de déterminer ΔE_v . Varache *et al.* [24] proposèrent plutôt d'utiliser une autre relation: $qV_{bi} = \Delta E_v + E_g^{c-Si} - (E_a)_{bulk}^{c-Si} - (E_a)_{bulk}^{a-Si:H}$, où E_g^{c-Si} est le gap du

en fonction de $1000/T$ (voir Figure 3-4b), i.e. le diagramme d'Arrhenius, permet d'extraire l'énergie d'activation E_a , qui correspond au coefficient directeur de la droite $\log(G) = f(1000/T)$.

silicium cristallin, $(E_a)_{bulk}^{c-Si} = E_c - E_f$ loin de l'interface et donc ne dépendant que du dopage du c-Si, $(E_a)_{bulk}^{a-Si:H} = E_f - E_v$ mesuré par conductance planaire dans un bulk de a-Si:H déposé sur du verre, et qV_{bi} est la chute totale de potentiel à l'hétérojonction déterminée par un ajustement de la courbe d'Arrhenius selon une loi exponentielle autour de 300 K. La valeur de ΔE_v ainsi obtenue pour une série d'échantillons se situe entre 0.32 et 0.42 eV, et est en accord avec d'autres mesures effectués par spectroscopie de photoémission [27].

3.2 Principe de la mesure de PhotoLuminescence Modulée (MPL)

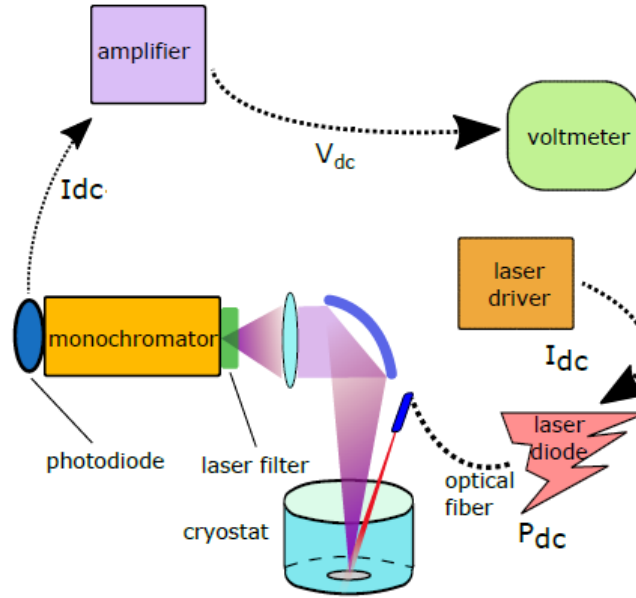


FIGURE 3-5 – Représentation schématique de la mesure de PhotoLuminescence [75].

La luminescence correspond à l'émission spontanée de photons d'un matériau hors équilibre. Elle est due aux recombinaisons radiatives des porteurs libres en excès. La photoluminescence correspond donc à la luminescence d'un matériau mis hors équilibre par injection de photons. Ces derniers sont absorbés par le matériau et créent ainsi un excédent de porteurs. Le taux de photons émis sortant du matériau dj_E dans un intervalle d'énergie $[\hbar\omega, \hbar\omega + d(\hbar\omega)]$ et par unité de temps peut être calculé à partir de la loi généralisée de Planck/Kirchhoff [76] :

$$dj_E = A(\hbar\omega) \frac{(\hbar\omega)^2}{4\pi^2 \hbar^3 c^2} \times \frac{d(\hbar\omega)}{\exp\left(\frac{\hbar\omega - (E_{f,n} - E_{f,p})}{kT}\right) - 1} \quad (3.8)$$

où $E_{f,n}$ et $E_{f,p}$ sont respectivement les quasi-niveaux de Fermi des électrons et des trous, k est la constante de Boltzmann, T la température du matériau, c est la célérité de la lumière, et $A(\hbar\omega)$ est l'absorbance du matériau à l'énergie $\hbar\omega$ définie par:

$$A(\hbar\omega) = \frac{[1 - R_{FAV}(\hbar\omega)][1 + R_{FAR}(\hbar\omega)e^{-\alpha(\hbar\omega)d}][1 - e^{-\alpha(\hbar\omega)d}]}{1 - R_{FAV}(\hbar\omega)R_{FAR}(\hbar\omega)e^{-2\alpha(\hbar\omega)d}} \quad (3.9)$$

où R_{FAV} et R_{FAR} sont respectivement les coefficients de réflexion en face avant et en face arrière de l'échantillon, α et d sont respectivement le coefficient d'absorption et l'épaisseur du matériau.

La mesure de l'intensité du signal de photoluminescence en fonction de l'énergie des photons reçus et de la température de l'échantillon permet ainsi de déterminer la séparation des quasi-niveaux de Fermi dans le matériau. Puis, à partir de celle-ci, il est possible de calculer la concentration de porteurs minoritaires en excès (Δ_{mino}) et leur durée de vie effective par:

$$\tau_{mino}^{eff} = \frac{\Delta_{mino}}{G} \quad (3.10)$$

avec

$$\Delta_{mino} = \frac{1}{2} \left(\sqrt{N_{dopage}^2 + 4n_i^2 \left(e^{\frac{E_{f,n} - E_{f,p}}{kT}} - 1 \right)} - N_{dopage} \right) \quad (3.11)$$

et

$$G = \frac{(1 - R_{FAV})\phi_0(1 - e^{-\alpha d})}{d} \quad (3.12)$$

où N_{dopage} est le dopage du matériau, n_i la concentration intrinsèque de porteurs, G le taux de photogénération moyen dans le matériau, et ϕ_0 le flux incident.

La mesure de la durée de vie effective par cette méthode nécessite donc un étalonnage optique précis, contrairement à la photoluminescence en régime modulé décrite ci-après.

La technique de mesure de PhotoLuminescence Modulée (MPL) a été développée par Brüggemann et Reynolds en 2006 [70]. Cette technique consiste à illuminer l'échantillon avec une lumière monochromatique modulée et mesurer la photoluminescence émise par l'échantillon, par conséquent aussi modulée (Figure 3-6). Une détection synchrone mesure l'amplitude du signal reçu et son déphasage par rapport à la lumière incidente en fonction de la fréquence. Ces deux résultats permettent

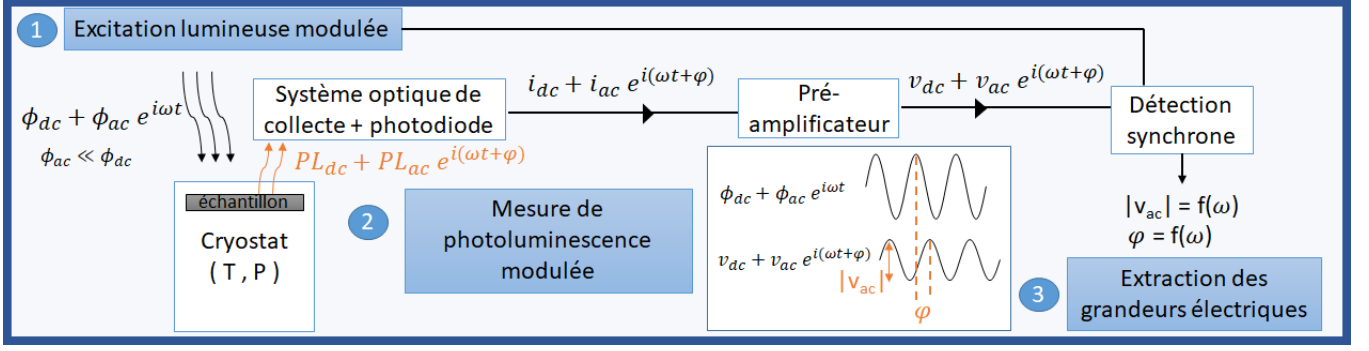


FIGURE 3-6 – Représentation schématique de la mesure de PhotoLuminescence Modulée.

de déterminer la durée de vie différentielle effective des porteurs minoritaires du bulk définie par:

$$\tau_p^{eff,diff} = \frac{d\Delta_{mino}}{dR} \quad (3.13)$$

où Δ_{mino} est l'excédent de porteurs minoritaires et R le taux de recombinaison.

Les équations de principe de la MPL sont décrites ci-dessous.

L'équation 3.8 peut se ré-écrire sous la forme suivante:

$$dj_E = A(\hbar\omega) \frac{(\hbar\omega)^2}{4\pi^2 \hbar^3 c^2} \times \frac{\exp(\frac{E_{f,n} - E_{f,p}}{kT})}{\exp(\frac{\hbar\omega}{kT}) - \exp(\frac{E_{f,n} - E_{f,p}}{kT})} d(\hbar\omega) \quad (3.14)$$

Lorsque l'énergie du photon émis est supérieure à la séparation des quasi-niveaux de Fermi, i.e. $\hbar\omega \gg E_{f,n} - E_{f,p}$, ce qui est généralement vrai pour les mesures effectuées sur le silicium cristallin, on peut faire l'approximation suivante:

$$dj_E = A(\hbar\omega) \frac{(\hbar\omega)^2}{4\pi^2 \hbar^3 c^2} \times \frac{\exp(\frac{E_{f,n} - E_{f,p}}{kT})}{\exp(\frac{\hbar\omega}{kT})} d(\hbar\omega) \quad (3.15)$$

De plus,

$$\exp(\frac{E_{f,n} - E_{f,p}}{kT}) = \frac{np}{n_i^2} \quad (3.16)$$

D'où,

$$dj_E = A(\hbar\omega) \frac{(\hbar\omega)^2 \exp(-\frac{\hbar\omega}{kT})}{4\pi^2 \hbar^3 c^2 n_i^2} d(\hbar\omega) \times np \quad (3.17)$$

Soit,

$$j_E = B \times np \quad (3.18)$$

avec

$$B = \int A(\hbar\omega) \frac{(\hbar\omega)^2 \exp(-\frac{\hbar\omega}{kT})}{4\pi^2 \hbar^3 c^2 n_i^2} d(\hbar\omega) \quad (3.19)$$

Nous retrouvons bien ici l'expression du taux de recombinaison radiatif.

Maintenant, si le flux de photons incidents est modulé autour d'une valeur moyenne ϕ_0 :

$$\phi(t) = \phi_0 + \phi_1 e^{i\omega t} \quad (3.20)$$

où ϕ_1 est l'amplitude de la modulation et $\omega (= 2\pi f)$ sa pulsation à la fréquence f . Le taux de photogénération, le nombre de porteurs en excès et le signal de photoluminescence sont par conséquent de la même forme:

$$G(t) = G_0 + G_1 e^{i\omega t} \quad (3.21)$$

$$\Delta p(t) = \Delta p_0 + \Delta p_1 e^{i\omega t} \quad (3.22)$$

$$\Delta n(t) = \Delta n_0 + \Delta n_1 e^{i\omega t} \quad (3.23)$$

$$j_E(t) = B \times n(t)p(t) = B \times [n_0 + \Delta n_0 + \Delta n_1(t)] [p_0 + \Delta p_0 + \Delta p_1(t)] \quad (3.24)$$

$$j_E(t) = B \times [(n_0 + \Delta n_0)(p_0 + \Delta p_0) + \Delta n_1(t)(p_0 + \Delta p_0) + \Delta p_1(t)(n_0 + \Delta n_0) + \Delta n_1(t)\Delta p_1(t)] \quad (3.25)$$

$$j_E(t) = B \times [j_{E,0} + j_{E,1}(t) + j_{E,2}(t)] \quad (3.26)$$

Avec $j_{E,0}$, $j_{E,1}$ et $j_{E,2}$ respectivement les composantes d'ordre 0, 1 et 2 de signal de photoluminescence. La composante d'ordre 0 représente la composante continue de photoluminescence, alors que celles d'ordres 1 et 2 correspondent à la composante alternative. Lors de nos mesures de MPL la détection synchrone est réglée sur l'ordre 1. Si l'on considère que $\Delta n_0 = \Delta p_0$ et que $\Delta n_1(t) = \Delta p_1(t)$ celle-ci s'exprime alors comme:

$$j_{E,1}(t) = B \times (p_0 + n_0 + 2\Delta p_0)\Delta p_1(t) \quad (3.27)$$

La détection synchrone peut également être réglée sur l'ordre 2 mais pour nos échantillons aucun

signal ne parvient de cette composante, nous pouvons donc la négliger.

L'équation 3.27 nous montre que le signal de photoluminescence modulée est directement proportionnel à la variation de la concentration alternative de porteurs $\Delta p_1(t)$. Nous allons maintenant la relier aux grandeurs mesurées expérimentalement: l'amplitude du signal alternatif et son déphasage.

D'après l'équation de continuité, la variation de la concentration de porteurs en absence de champ électrique extérieur s'exprime comme:

$$\frac{d\Delta p(t)}{dt} = G(t) - R(t) \quad (3.28)$$

où R est le taux de recombinaison total regroupant tous les mécanismes de recombinaison présents dans l'échantillon.

et peut se ré-écrire comme:

$$\frac{d^2\Delta p(t)}{dt^2} = \frac{dG(t)}{dt} - \frac{dR(t)}{dt} \quad (3.29)$$

$$\frac{d^2\Delta p(t)}{dt^2} = \frac{dG(t)}{dt} - \frac{dR(t)}{d\Delta p(t)} \frac{d\Delta p(t)}{dt} \quad (3.30)$$

$$\frac{d^2\Delta p(t)}{dt^2} = \frac{dG(t)}{dt} - \frac{1}{\tau_p^{eff,diff}} \frac{d\Delta p(t)}{dt} \quad (3.31)$$

avec

$$\frac{1}{\tau_p^{eff,diff}} = \frac{1}{\tau_{rad}} + \frac{1}{\tau_{Aug}} + \frac{1}{\tau_{SRH}} + \frac{2}{\tau_{surf}} \quad (3.32)$$

pour un échantillon passivé de manière identique en faces avant et arrière pour que $\tau_{surf,FAV} = \tau_{surf,FAR} = \tau_{surf}$.

Si un mécanisme de recombinaison domine sur les autres, la mesure de MPL donnera la durée de vie différentielle liée à ce mécanisme de recombinaison (SRH, Auger, radiatif, ou de surface).

En remplaçant les termes de l'équation 3.31 avec les équations 3.21 et 3.22, on obtient:

$$(i\omega)^2 \Delta p_1 e^{i\omega t} = (i\omega) G_1 e^{i\omega t} - \frac{1}{\tau_p^{eff,diff}} (i\omega) \Delta p_1 e^{i\omega t} \quad (3.33)$$

$$(i\omega) \Delta p_1 = G_1 - \frac{\Delta p_1}{\tau_p^{eff,diff}} \quad (3.34)$$

$$\Delta p_1(i\omega + \frac{1}{\tau_p^{eff,diff}}) = G_1 \quad (3.35)$$

$$\Delta p_1 = \frac{G_1 \tau_p^{eff,diff}}{1 + i\omega \tau_p^{eff,diff}} \quad (3.36)$$

On peut par conséquent en déduire les expressions de l'amplitude ($|\Delta p_1|$) et du déphasage (φ) du signal de photoluminescence à partir des parties réelle et imaginaire de l'équation 3.36 [70]:

$$|\Delta p_1| = \frac{G_1 \tau_p^{eff,diff}}{\sqrt{1 + (\omega \tau_p^{eff,diff})^2}} \quad (3.37)$$

$$\varphi = -\arctan(\omega \tau_p^{eff,diff}) \quad (3.38)$$

La durée de vie différentielle effective peut donc être à la fois extraite de l'amplitude et du déphasage issus de la mesure MPL. Néanmoins, l'extraction à partir du déphasage présente l'avantage d'être indépendante des conditions d'éclairement pour un régime d'injection donné alors que celle basée sur l'amplitude nécessite de connaître systématiquement le taux de génération alternatif.

3.3 Principe de la mesure de PhotoCourant Modulé (MPC)

La technique du photocourant modulé est basée sur la physique d'échange d'électrons et de trous entre les états étendus (bandes de conduction et de valence) et les états localisés du matériau (défauts dans le gap), la grandeur mesurée étant le temps de relaxation des porteurs par les défauts. Elle a en premier lieu été développée par Oheda en 1981 qui l'a appliqué pour caractériser la distribution énergétique des états dans le gap de cristaux de CdS [77] ainsi que ceux du silicium amorphe non-dopé [78]. La méthode d'analyse des résultats a par la suite été simplifiée par Brüggemann *et al.* [79], et Longeaud et Kleider [80, 81] ont proposé un modèle plus complet et plus généralisé du calcul de la densité d'états de défauts.

La technique a été appliquée à divers matériaux comme les CIGS [82, 83], les tellurures [84, 85, 86], les puits quantiques [87], sulfure d'antimoine [88] et même plus récemment à un matériau organique (pentacene) [89, 90].

Le principe de mesure est similaire à celui de la MPL: l'échantillon est illuminé avec un flux

monochromatique modulé, sauf qu'au lieu de mesurer la photoluminescence on mesure l'amplitude et le déphasage du photocourant qui passe entre deux électrodes coplanaires en fonction de la fréquence d'excitation et de la température (Figure 3-7). Ce déphasage est lié à l'interaction des porteurs photogénérés (qui se situent naturellement dans les états étendus) avec les défauts (états localisés).

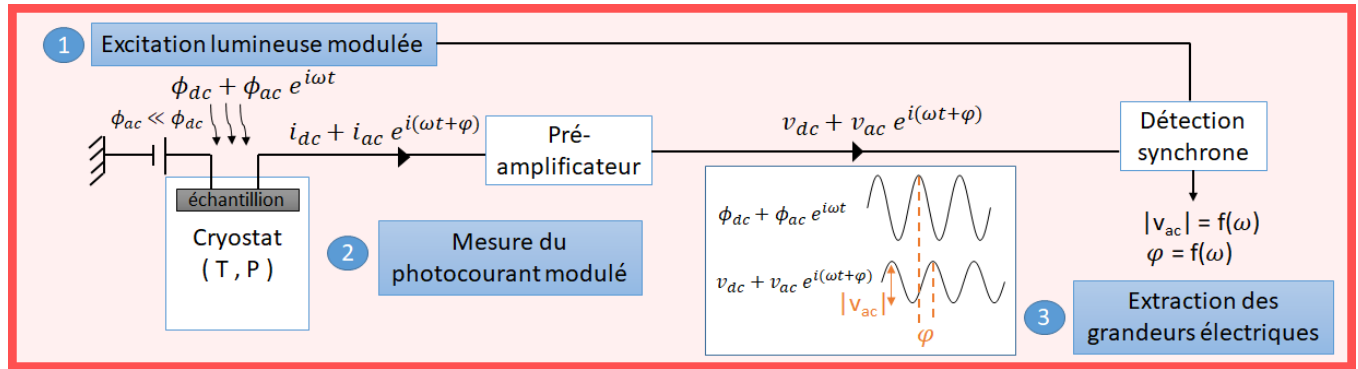


FIGURE 3-7 – Représentation schématique de la mesure du PhotoCourant Modulé.

Kleider *et al.* ont notamment établi deux régimes fréquentiels distincts [15]: (i) les basses fréquences, pour lesquelles le photocourant est lié à la recombinaison SRH des porteurs avec les défauts (Figure 3-8a), et (ii) les hautes fréquences, où le photocourant est lié aux mécanismes de piégeage et dépiégeage des porteurs entre états étendus et les états localisés (Figure 3-8b). La séparation des deux régimes se fait à la fréquence $f_c = \frac{\omega_c}{2\pi}$ telle que:

$$\omega_c = c_n n_{dc} + c_p p_{dc} \quad (3.39)$$

où n_{dc} et p_{dc} sont respectivement les concentrations d'électrons et de trous libres générés par la partie continue de l'excitation lumineuse, c_n et c_p sont les coefficients de capture des électrons et des trous par les défauts.

La mesure est faite dans l'un ou l'autre des régimes selon la fréquence d'excitation expérimentale, le taux de génération continu et la température de l'échantillon. En effet, la distinction entre les deux régimes dépend de la position de l'énergie du défaut sondé par rapport à celle des quasi-niveaux de Fermi des porteurs piégés. Ces derniers (E_{t_n} pour les électrons et E_{t_p} pour les trous) sont définis par le taux de génération continu et la température du matériau, alors que la fréquence de l'excitation ($f = \frac{\omega}{2\pi}$) détermine l'énergie du défaut sondé E_t . Si $\omega \ll \omega_c$ alors $E_{t_p} < E_t < E_{t_n}$ et les mécanismes de recombinaison dominant. Inversement, si $\omega \gg \omega_c$ alors $E_t < E_{t_p}$ ou $E_t > E_{t_n}$ et

dans ce cas, ce sont les mécanismes de piégeage et dépiégeage qui dominant. La Figure 3-8 résume les conditions pour chaque régime et les principes et équations de chacun des deux régimes sont rappelés dans les sous-sections suivantes.

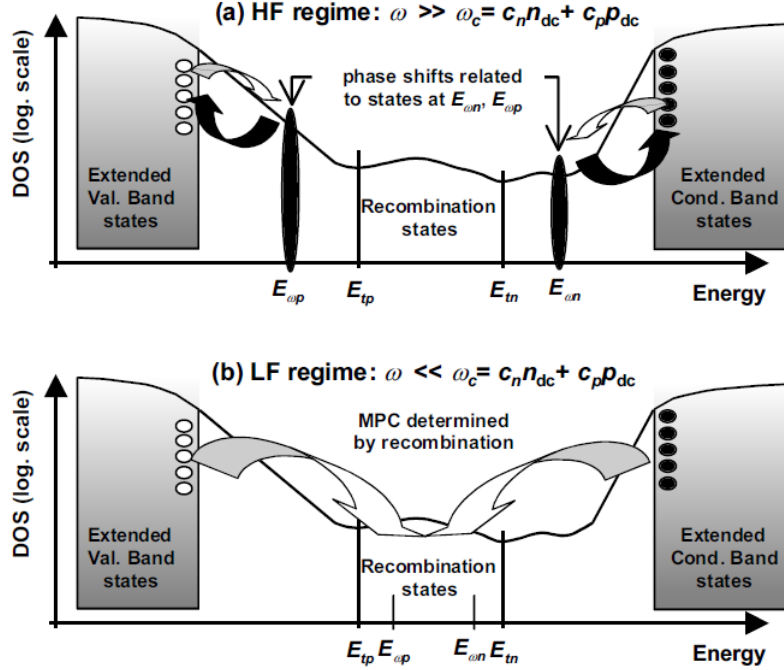


FIGURE 3-8 – Représentation schématique des conditions de chacun des deux régimes possibles dans la mesure du photocourant modulé: (a) régime hautes fréquences lié aux mécanismes de piégeage/dépiégeage et (b) régimes basses fréquences lié aux mécanismes de recombinaison [15].

3.3.1 MPC-HF

A haute fréquence, i.e. lorsque $\omega \gg \omega_c$, la fréquence de réémission des porteurs est supérieure à leur fréquence de capture, et les énergies sondées se trouvent en dehors de la zone de recombinaison. Il est alors possible de reconstruire la DOS pour les énergies situées entre E_c et E_{tn} ou entre E_v et E_{tp} . En effet, il existe deux énergies (E_{ω_n} et E_{ω_p}) pour lesquelles la fréquence de réémission des porteurs piégés (électrons et trous) coïncide avec la fréquence d'excitation: $e_n(E_{\omega_n}) = \omega$ et $e_p(E_{\omega_p}) = \omega$. Les pièges situés aux énergies en dessous ou au dessus ont des fréquences d'émission trop longues ou trop courtes par rapport à la fréquence de l'expérience pour induire un déphasage. En effet, la fréquence d'émission d'un porteur piégé ω_t dépend de manière exponentielle avec la distance en énergie du défaut (E_t) avec la bande de conduction (E_c) [18]:

$$\omega_t = \omega_0 \exp\left(\frac{E_c - E_t}{kT}\right) \quad (3.40)$$

où ω_0 est la fréquence de capture du piège.

Par conséquent, chaque fréquence d'excitation correspond à une énergie sondée. La densité d'états des défauts (DOS) à cette énergie, $N(E_{\omega_n})$ ou $N(E_{\omega_p})$, s'exprime à partir de l'amplitude et du déphasage du photocourant ($|I_{ac}|$ et φ) par les relations suivantes qui ont été simplifiées pour les cas où un type de porteurs contribue majoritairement au photocourant [15]:

si ce sont les électrons:

$$N(E_{\omega_n}) = \frac{2\mu_n S q \xi G_{ac} \sin \varphi}{\pi c_n kT |I_{ac}|} \quad (3.41)$$

$$E_c - E_{\omega_n} = kT \ln\left(\frac{c_n N_c}{\omega}\right) \quad (3.42)$$

si ce sont les trous:

$$N(E_{\omega_p}) = \frac{2\mu_p S q \xi G_{ac} \sin \varphi}{\pi c_p kT |I_{ac}|} \quad (3.43)$$

$$E_{\omega_p} - E_v = kT \ln\left(\frac{c_p N_v}{\omega}\right) \quad (3.44)$$

où μ_n et μ_p sont les mobilités respectives des électrons et de trous, c_n et c_p sont leurs coefficients de capture, S est la section traversée par le photocourant, q est la charge élémentaire d'un électron, ξ est la valeur absolue du champ électrique appliqué, G_{ac} est la composante alternative du taux de photogénération, k est la constante de Boltzmann, T est la température, N_c et N_v sont les densités d'états effectives dans la bande de conduction et de valence, et ω est la pulsation de modulation.

Force est de constater qu'il est nécessaire de connaître la valeur du rapport $\frac{\mu}{c}$ et du produit $c_n N_c$ (ou $c_p N_v$ si les trous sont majoritaires) pour déterminer la DOS absolue. Par conséquent on représente souvent le rapport $\frac{cN}{\mu}$ en ordonnée, mais pour reconstruire l'échelle des énergies (abscisses) on utilise couramment des valeurs typiques de coefficient de capture et de densité N_c ou N_v . Un exemple de reconstruction de la DOS à partir de la mesure de MPC-HF d'un échantillon de silicium amorphe est représenté sur la Figure 3-9. Chaque courbe de la même couleur (et même symbole) correspond à une température différente (entre 450 K et 110 K). Chaque point d'une de ces courbes correspond à une fréquence d'excitation lumineuse (entre 12 Hz et 40 kHz). L'enveloppe

à haute fréquence représente la forme de la DOS du matériau amorphe. Les paramètres utilisés pour reconstruire l'échelle énergétique sont $N_c = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ et $c_n = v_{th}\sigma$, où v_{th} est la vitesse de recombinaison des porteurs prise égale à 10^7 cm.s^{-1} pour les deux types de porteurs, σ est la section efficace de capture et vaut 10^{-15} cm^2 , ordres de grandeur typiques habituellement utilisés pour le silicium amorphe.

Une méthode permettant d'estimer le rapport $\frac{\mu}{c}$ consiste à faire correspondre les reconstructions de DOS à partir des mesures à hautes et basses fréquences. Nous détaillons maintenant l'analyse de la mesure de MPC à basse fréquence (MPC-BF).

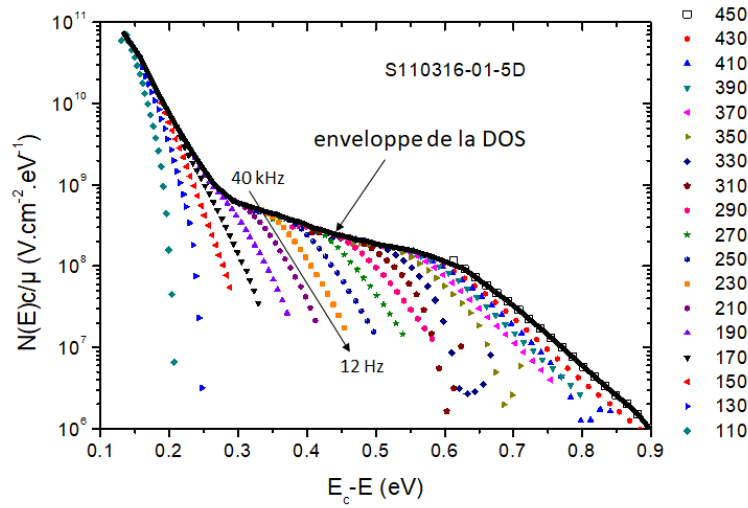


FIGURE 3-9 – Rapport $\frac{cN}{\mu}$ déterminé à partir des mesures de MPC en fréquence et en température pour un échantillon de silicium amorphe (S110316-01-5D). L'enveloppe à haute fréquence (régime de piégeage/dépiégeage) représente l'allure de la DOS.

3.3.2 MPC-BF

A basse fréquence, les énergies sondées se trouvent dans la zone de recombinaison où la fréquence de ré-émission de porteurs est beaucoup plus faible que celle de capture. D'ailleurs, l'énergie sondée ne dépend plus de la fréquence d'excitation et le faible déphasage mesuré provient des états aux bords de la zone de recombinaison [91]. Si le quasi-niveau de Fermi des porteurs piégés coïncide avec celui des porteurs libres, la densité de défauts au bord de la zone de recombinaison peut être déduite, sous la condition qu'un type de porteurs contribue majoritairement à la fois au photocourant et aux

recombinaisons, par la relation suivante [91]:

$$N(E_{t_n}) \text{ ou } N(E_{t_p}) = \frac{2G_{dc}}{kT} \frac{\tan \varphi}{\omega} \quad (3.45)$$

La position énergétique du niveau sondé est alors déterminé par:

$$E_c - E_{t_n} = kT \ln\left(\frac{\mu_n N_c S q \xi}{I_{dc}}\right) \quad (3.46)$$

ou

$$E_{t_p} - E_v = kT \ln\left(\frac{\mu_p N_v S q \xi}{I_{dc}}\right) \quad (3.47)$$

où G_{dc} est la composante continue du taux de photogénération, k la constante de Boltzmann, T la température, φ le déphasage du courant par rapport à l'excitation lumineuse, ω la pulsation de modulation, μ_n et μ_p sont les mobilités respectives des électrons et des trous, N_c et N_v sont les densités d'états effectives dans les bandes de conduction et de valence, S est la section traversée par le photocourant, q est la charge élémentaire d'un électron, ξ est la valeur absolue du champ électrique appliqué, et I_{dc} est la composante continue du photocourant.

Pour que le quasi-niveau de Fermi des porteurs piégés coïncide avec celui des porteurs libres, il faut qu'il soit distant du niveau de Fermi d'équilibre d'au moins plusieurs fois la valeur de kT . Il faut par conséquent que le taux de photogénération soit élevé.

D'après ces équations, l'énergie sondée dépend de la température et du photocourant continu. Pour la faire varier on peut donc, comme en MPC-HF, changer la température de l'échantillon ou le flux lumineux incident. Mais expérimentalement, que ce soit aux hautes ou basses fréquences, changer la température permet de sonder une plus large gamme d'énergies. C'est donc cette méthode qui est préférée en MPC.

Contrairement à la mesure HF, la reconstruction de la DOS à partir des mesures à basses fréquences ne nécessite de connaître que le taux de génération continu. Or, ce dernier peut être aisément déterminé pour une couche mince par la relation $G = \alpha\phi$, où ϕ est le flux incident et α le coefficient d'absorption du matériau. Un exemple de reconstruction de la DOS à partir de la MPC-BF est représentée sur la Figure 3-10 (cercles) et comparée à la reconstruction MPC-HF (triangles) ainsi que la DOS introduite dans le calcul [91].

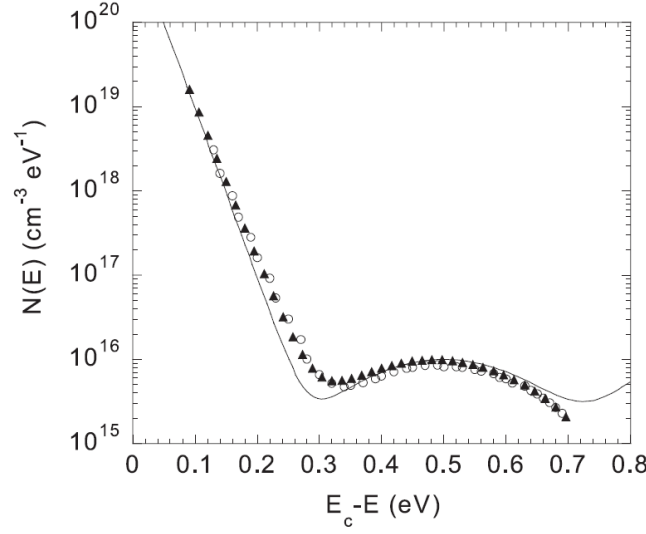


FIGURE 3-10 – Exemple de reconstruction de la DOS à partir de la MPC-BF (cercles), comparée à la reconstruction MPC-HF (triangles) ainsi que la DOS introduite dans le calcul [91].

Dans le cadre de cette thèse nous allons étudier l'application de la technique MPC au cas d'hétérojonctions de silicium dans l'hypothèse où elle pourrait nous apporter des informations sur les défauts situés à l'interface. En effet, le passage du courant est *a priori* privilégié dans cette région en raison de la zone d'inversion forte. La validité des équations analytiques vues dans cette section, que ce soit pour le régime HF ou BF, n'étant pas établie pour ce cas particulier, nous recourrons aux simulations numériques 2D pour interpréter nos résultats expérimentaux. Le principe de fonctionnement de ce simulateur numérique est décrit dans la section qui suit.

3.4 Description de l'outil de simulation Silvaco ATLAS

ATLAS est un simulateur de dispositifs électroniques basé sur les lois de la physique. Il fonctionne sur le principe des volumes finis ce qui le rend particulièrement adapté aux simulations d'interfaces. Cette méthode permet de résoudre numériquement les équations aux dérivées partielles à l'aide d'un maillage constitué de petits volumes finis disjoints. Le simulateur calcule les flux entrant et sortant au niveau de chaque volume, puis utilise le théorème de flux-divergence (ou Green-Ostrogradski) pour obtenir un résultat approché de l'équation:

$$\iiint_V \text{div } \vec{F} \cdot dV = \oint_{\partial V} \vec{F} \cdot d\vec{S} \quad (3.48)$$

où $\vec{F}$ est le flux du champ vectoriel, V est le volume, ∂V est la frontière de V , et $d\vec{S}$ est le

vecteur normal à la surface, dirigé vers l'extérieur et de norme égale à l'élément de surface qu'il représente.

Les simulations avec ATLAS peuvent être réalisées en deux ou trois dimensions ce qui permet de modéliser les situations où le flux peut être pluridirectionnel, comme c'est le cas du courant électrique pour les mesures en coplanaire sur les hétérojonctions (conductance et MPC) ainsi que pour les géométries complexes tels que les nanofils.

Le fonctionnement du logiciel ATLAS repose sur trois modèles physiques issus des équations de Maxwell [92]:

- L'équation de Poisson : relie le potentiel électrostatique à la densité de charges,

$$\text{div}(\vec{\nabla}\psi) = \Delta\psi = -\frac{\rho}{\varepsilon} \quad (3.49)$$

où ε est la permittivité diélectrique, ψ le potentiel électrostatique, et ρ la densité de charges.

- Les équations de continuité : expriment la variation de la concentration de porteurs de charge en fonction de leur taux de génération et de recombinaison,

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q}\text{div}(\vec{j}_n) + G_n - R_n \quad (3.50)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q}\text{div}(\vec{j}_p) + G_p - R_p \quad (3.51)$$

où n et p sont les concentrations respectives d'électrons et de trous, J_n et J_p leurs densités de courant, G_n et G_p leurs taux de génération, R_n et R_p leurs taux de recombinaison, et q la charge élémentaire d'un électron.

- Les équations de transport : basées sur le modèle de dérive-diffusion et qui relient les densités de courant aux champs électriques et aux gradients de concentration,

$$\vec{j}_n = q\mu_n n \vec{\xi} + qD_n \vec{\nabla} n \quad (3.52)$$

$$\vec{j}_p = q\mu_p p \vec{\xi} - qD_p \vec{\nabla} p \quad (3.53)$$

où $\vec{\xi}$ est le champ électrique, μ_n et μ_p sont les mobilités respectives des électrons et des trous, D_n et D_p leurs coefficients de diffusion définis par les relations d'Einstein:

$$D_n = \mu_n \frac{kT}{q} \quad (3.54)$$

$$D_p = \mu_p \frac{kT}{q} \quad (3.55)$$

où k est la constante de Boltzmann et T la température.

L'utilisateur peut ensuite choisir parmi les modèles électriques implémentés dans ATLAS ceux qui sont adaptés au dispositif qu'il souhaite simuler. Il peut notamment choisir les modèles de recombinaison à prendre en compte, le modèle de variation de la mobilité avec la concentration de porteurs et/ou de la température, la présence ou non de l'effet tunnel, etc. Les modèles utilisés pour chaque type de simulation seront précisés dans les chapitres résultats.

Pour les simulations sous éclairnement, le taux de photogénération en chaque noeud du maillage est calculé selon le modèle optique choisi par l'utilisateur. ATLAS en comprend quatre [92]:

- Ray Tracing : modèle d'optique géométrique basé sur les lois de Snell-Descartes

Le taux de photogénération G , dans la direction du flux lumineux (axe y), s'exprime par la loi de Beer-Lambert:

$$G(y) = \eta P(y) \frac{\lambda}{hc} \alpha e^{-\alpha y} \quad (3.56)$$

où η est le rendement de photogénération (nombre de porteurs photogénérés par photon absorbé), P la puissance absorbée, λ la longueur d'onde d'éclairnement, h la constante de Planck, c la célérité de la lumière, et α est le coefficient d'absorption défini par:

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (3.57)$$

où k est la composante imaginaire de l'indice optique de réfraction.

La puissance absorbée tient compte des pertes par absorption au fur et à mesure que le rayon lumineux progresse dans la structure, mais aussi des réflexions et transmissions aux interfaces R et T tels que:

$$R = \left(\frac{\xi_r}{\xi_i} \right)^2 \quad (3.58)$$

$$T = \left(\frac{\xi_t}{\xi_i} \right)^2 \frac{n_2 \cos \theta_t}{n_1 \cos \theta_i} \quad (3.59)$$

où ξ_i , ξ_r et ξ_t sont respectivement les amplitudes des champs électriques incident, réfléchi et transmis tels que:

$$\xi_r = \frac{n_1 \cos \theta_i - n_2 \cos \theta_t}{n_1 \cos \theta_i + n_2 \cos \theta_t} \xi_i \quad (3.60)$$

$$\xi_t = \frac{2n_1 \cos \theta_i}{n_1 \cos \theta_i + n_2 \cos \theta_t} \xi_i \quad (3.61)$$

où n_1 et n_2 sont les indices de réfraction respectifs des milieux 1 et 2, θ_i est l'angle d'incidence du rayon lumineux, et θ_t l'angle de transmission calculé par les lois de Descartes:

$$\begin{cases} \theta_r = -\theta_i \\ n_1 \sin \theta_i = n_2 \sin \theta_t \end{cases} \quad (3.62)$$

où θ_r est l'angle de réflexion.

Ce modèle peut être utilisé pour des simulations optiques en 2D et 3D. L'utilisateur choisit le nombre de réflexions à calculer pour chaque interface. Les phénomènes d'interférence et de diffraction n'étant pas pris en compte, les intensités lumineuses s'additionnent.

Pour les trois modèles optiques suivants, le taux de photogénération est calculé à partir de la divergence du vecteur de Poynting et s'exprime:

$$G = \frac{\Im(\varepsilon) |\vec{\xi}|^2}{2\hbar} \quad (3.63)$$

où $\vec{\xi}$ est le champ électrique, $\hbar$ la constante de Planck réduite, et $\Im(\varepsilon)$ la composante imaginaire de la permittivité diélectrique liée au coefficient d'absorption α par:

$$\alpha = \frac{\omega}{nc} \Im(\varepsilon) \quad (3.64)$$

où c est la célérité de la lumière, ω sa pulsation, et n l'indice de réfraction du milieu.

- Transfer Matrix Method : relie les composantes tangentielles des champs électrique et magné-

tique par la matrice suivante

$$\begin{bmatrix} \xi(Z_0) \\ H(Z_0) \end{bmatrix} = M_1, M_2, \dots M_m \begin{bmatrix} \xi(Z_m) \\ H(Z_m) \end{bmatrix} \quad (3.65)$$

où $\xi(z)$ et $H(z)$ sont les composantes tangentielles respectives des champs électrique et magnétique, Z_0 et Z_m sont les coordonnées limites de z , m est le nombre de couches traversées, et M est la matrice caractéristique décrivant chaque couche tel que:

$$M_i = \begin{bmatrix} \cos \varphi & j \sin \varphi / Y \\ jY \sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix} \quad (3.66)$$

où φ est déphasage de l'onde dans la couche tel que:

$$\varphi = \frac{2\pi}{\lambda} \tilde{n} d \cos \Theta \quad (3.67)$$

où λ est la longueur d'onde, $\tilde{n}$ l'indice optique complexe de réfraction de la couche, d l'épaisseur de la couche, et Θ l'angle de propagation de l'onde.

Y est l'admittance optique de la couche. Elle s'exprime selon la polarisation, parallèle ($Y^{(p)}$) ou perpendiculaire ($Y^{(s)}$), par:

$$Y^{(s)} = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \tilde{n} \cos \Theta \quad (3.68)$$

ou

$$Y^{(p)} = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \tilde{n} / \cos \Theta \quad (3.69)$$

où ε_0 et μ_0 sont respectivement la permittivité diélectrique et la perméabilité magnétique du vide.

Cette méthode tient compte des interférences entre les rayons réfléchis, mais n'est valable que pour les simulations optiques à 1D.

- Beam Propagation Method : modèle permettant de prendre en compte les effets de diffraction et de cohérence, basé sur l'équation d'onde d'Helmoltz définie comme

$$\vec{\nabla}^2 \vec{\xi}(\tilde{r}, t) - \frac{\tilde{n}^2}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{\xi}(\tilde{r}, t)}{\partial t^2} = \vec{0} \quad (3.70)$$

où $\vec{\xi}(\tilde{r}, t)$ est champ électrique, $\tilde{n}$ l'indice complexe de réfraction du matériau et c la célérité de la lumière.

Ce modèle permet d'effectuer des simulations optiques 2D en prenant en compte la diffraction et la cohérence de phase. Il convient surtout à des structures dont les dimensions sont du même ordre de grandeur que la longueur de l'onde lumineuse.

- Finite Difference Time Domain (FDTD) : résout directement les équations de Maxwell de propagation de la lumière en 2D ou 3D telles que

$$\frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu}(\vec{\nabla} \times \vec{\xi} + \vec{M}_{source} + \sigma^* \vec{H}) \quad (3.71)$$

$$\frac{\partial \vec{\xi}}{\partial t} = -\frac{1}{\varepsilon}(\vec{\nabla} \times \vec{H} + \vec{J}_{source} + \sigma \vec{\xi}) \quad (3.72)$$

où $\vec{\xi}$ et $\vec{H}$ sont respectivement les champs électrique et magnétique, ε et μ sont respectivement la permittivité diélectrique et la perméabilité magnétique du matériau, $\vec{J}_{source}$ est la densité de courant électrique, $\vec{M}_{source}$ est la densité de courant magnétique équivalente, σ est la conductivité électrique, et σ^* est la perte magnétique équivalente.

Les simulations effectuées avec ce modèle permettent aussi bien la prise en compte des effets de réflexion que ceux de diffraction et d'interférence, mais sont très consommatrices en temps de calcul et mémoire disque.

En pratique la simulation avec ATLAS consiste à définir une structure et le maillage associé, soit à partir d'une interface graphique soit par une série de commandes dans un fichier qui sera lu par le compilateur (méthode utilisée dans cette thèse). Pour définir une structure il faut commencer par créer des couches en indiquant leurs dimensions et le matériau utilisé. Puis sont définies leur propriétés (paramètres électriques et optiques, dopage, défauts, etc.). Le maillage doit être adapté à la structure définie: par exemple il doit être choisi plus fin aux interfaces et zones présentant un gradient, et peut être plus grossier dans les zones moins sensibles pour optimiser le temps de calcul. Pour les simulations électriques il faut positionner les contacts et définir leurs propriétés (travail de sortie, vitesses de recombinaisons, etc.). Pour les simulations sous éclairage on définit une source

(longueur d'onde, puissance, taille du faisceau, position, angle d'incidence, etc.). Ensuite sont choisis les modèles électriques et optiques à appliquer à la structure (prédéfinis dans ATLAS ou définis par l'utilisateur par l'intermédiaire d'une fonction codée en langage C). Pour finir, l'utilisateur indique par des lignes de commande le type de simulation à effectuer (grandeurs à "mesurer", grandeurs à faire varier, régimes DC, AC ou temporel). Le déroulement de la simulation est visualisé dans la console. Les résultats sont enregistrés dans des fichiers si les commandes correspondantes ont été spécifiées dans le corps du code. Ces fichiers peuvent être de deux types: (i) un fichier comprenant la variation d'une grandeur par rapport à une autre (par exemple une caractéristique courant-tension), (ii) un fichier comprenant la cartographie spatiale d'une grandeur dans la structure (par exemple la concentration de porteurs). Ces fichiers sont visualisables par un outil dédié (TonyPlot) mais les résultats peuvent également être manipulés dans le corps du code pour extraire les grandeurs désirées (par exemple l'efficacité d'une cellule solaire à partir de sa caractéristique courant-tension, ou valeur de la concentration d'électrons à une position précise de la structure).

Dans le cadre de cette thèse nous avons modélisé les techniques de caractérisation utilisées pour obtenir les résultats expérimentaux: (i) conductance et photocourant modulé avec des contacts en configuration coplanaire, (ii) photoluminescence modulée en 2D (via un modèle semi-analytique). Nous avons également développé une fonction permettant de coupler les simulations optiques (réalisées avec un autre outil: RETICOLO) et les simulations électriques d'ATLAS pour l'étude des cellules à base de nanofils.

Chapitre 4

Étude expérimentale des propriétés d'interface de l'hétérostructure c-Si/a-Si:H

Dans ce chapitre nous présentons dans une première partie une étude de l'hétérojonction en régime statique (mesures de conductance coplanaire) qui nous permet de caractériser les échantillons en terme de niveau d'inversion à l'interface. Puis nous utilisons les mesures en régime dynamique (MPL et MPC) pour étudier l'hétérojonction en terme de défauts d'interface.

4.1 Mesures de conductance coplanaire pour l'étude des propriétés de l'hétérojonction

4.1.1 Description des échantillons

Nous disposons d'une série d'échantillons réalisés au CEA INES (lot 2600) par l'équipe de Delfina Muñoz, constitués d'un wafer de silicium cristallin (Cz, $3 \Omega \cdot \text{cm}$) dopé N ($N_d = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$) d'environ $150 \mu\text{m}$ d'épaisseur sur lequel ont été déposées de chaque côté, par dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma (PE-CVD), (i) une fine couche passivante de silicium amorphe intrinsèque d'épaisseur variable et (ii) une couche de 10 nm de silicium amorphe dopé P. Des électrodes coplanaires en argent ont ensuite été rajoutées à l'une des faces afin de pouvoir réaliser les mesures électriques. De plus, chaque échantillon présente différentes tailles d'espacement inter-electrodes, qui ont été déterminées avec précision au microscope. Un échantillon type est schématisé sur la Figure 4-1a. La symétrie des structures permet de supposer des vitesses de recombinaisons identiques en faces avant et arrière lors des mesures de durées de vie. Les différentes épaisseurs de (i)a-Si:H permettent de faire varier à la fois la densité de défauts à l'interface amorphe/cristallin et la courbure des bandes dans le c-Si.

Afin d'évaluer cette courbure des bandes, nous avons effectué des mesures de conductance planaire dont les résultats sont donnés dans la partie qui suit.

4.1.2 Résultats des mesures de conductance planaire

Pour commencer nous avons réalisé des mesures de courant d'obscurité en fonction de la tension appliquée entre les électrodes coplanaires (Figure 4-1b), et pour les différents espacements inter-électrodes disponibles. Un exemple de caractéristiques courant-tension est représenté sur la Figure 4-2 où nous comparons les comportements de quatre échantillons d'épaisseurs de (i)a-Si:H différentes. Nous observons d'une part que le courant mesuré diminue lorsque l'épaisseur de (i)a-Si:H augmente,

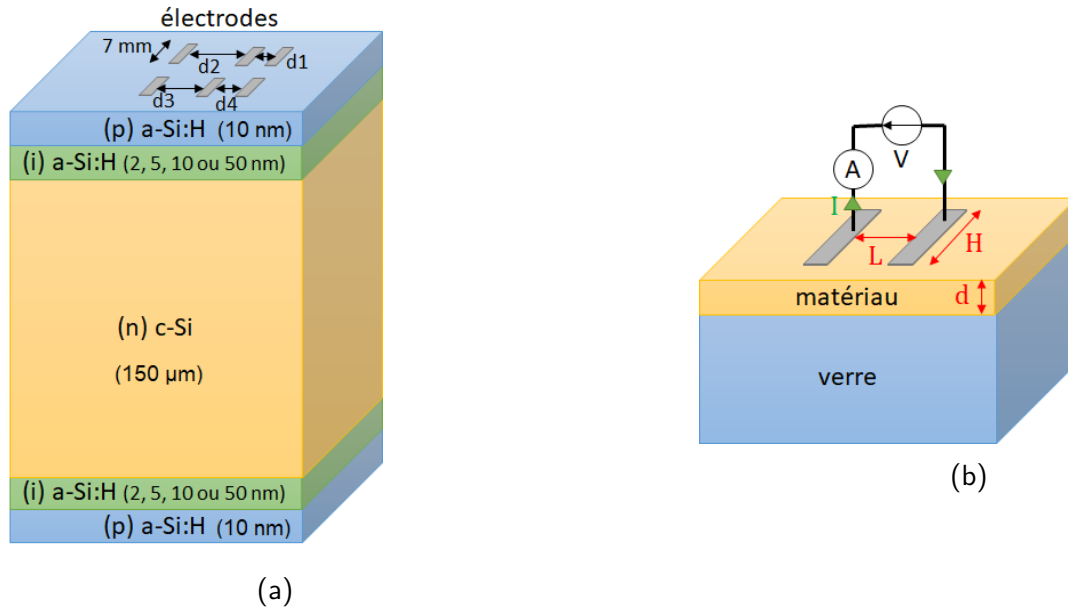


FIGURE 4-1 – (a) Représentation schématique d'un échantillon type du lot INES 2600. Les différents espacements inter-électrodes sont $d1 = 1.8$ mm, $d2 = 6.5$ mm, $d3 = 5$ mm et $d4 = 3.15$ mm. (b) Rappel du schéma de principe de la mesure de conductance.

ce qui était attendu puisque lorsque cette épaisseur croît, la chute de potentiel dans le (i)a-Si:H augmente et donc celle dans le c-Si proche de l'interface décroît. Il en résulte une diminution, voire la disparition, de la zone d'inversion forte et donc du canal de conduction.

D'autre part nous pouvons observer sur cette figure deux régimes: un premier pour les faibles polarisations ($-1 < V < 1$ V) où le courant varie linéairement avec la tension appliquée (Figure 4-2b) tel que attendu pour des mesures de conductance planaire, et un deuxième pour les polarisations plus élevées ($|V| > 1$ V) où le courant commence à varier plus lentement (Figure 4-2a). On remarque également qu'à forte polarisation inverse, l'échantillon de 50 nm d'épaisseur de (i)a-Si:H a un comportement asymétrique particulier que nous n'expliquons pas pour le moment mais pourrait provenir de l'asymétrie des contacts ou d'une ouverture d'un canal de conduction parasite.

Afin d'estimer la courbure de bandes à l'interface côté c-Si et de tenter d'expliquer le changement de régime observé expérimentalement nous effectuons une simulation de la mesure avec ATLAS. Nous modélisons à cet effet nos structures à hétérojonction (p/i)a-Si:H/(n)c-Si. Les paramètres de matériaux utilisés sont regroupés dans la Table 4.1 et les paramètres de modélisation des défauts du silicium amorphe issus du modèle Defect-Pool dans la Table 4.2. Le dopage du silicium cristallin vaut $N_d = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Les discontinuités de bandes résultantes valent respectivement $\Delta E_v = 0.4 \text{ eV}$ et $\Delta E_c = 0.18 \text{ eV}$. Les électrodes sont placées en configuration coplanaire avec un distance inter-

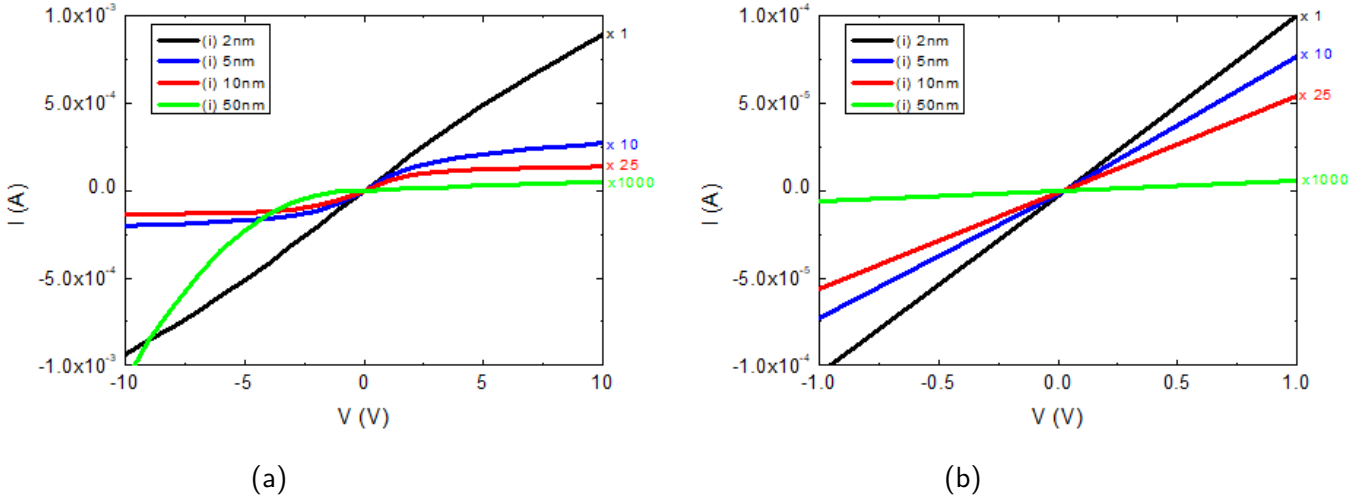


FIGURE 4-2 – Résultats expérimentaux de caractéristiques $I(V)$ en géométrie coplanaire, (a) $[+/- 10 \text{ V}]$ et (b) $[+/- 1 \text{ V}]$, pour quatre échantillons d'épaisseurs de (i)a-Si:H différentes (noir: 2 nm, bleu: 5 nm, rouge: 10 nm, vert: 50 nm). Les trois courbes d'épaisseurs les plus grandes ont été mises à l'échelle pour plus de clarté. Le facteur multiplicatif du courant est indiqué à côté de la courbe correspondante. L'espacement inter-électrodes est de 1.8 mm.

électrodes de 2 mm et leur travail de sortie ($W = 5.176 \text{ eV}$) est choisi de sorte à ce que les charges soient extraites en conditions de bandes plates. La vitesse de recombinaison aux électrodes est prise infinie pour les deux types de porteurs. Les recombinaisons d'interface sont également négligées dans cette simulation puisque ces dernières n'influent sur la conductivité que si la charge des défauts d'interface peut modifier la courbure de bandes et donc si cette charge est suffisamment forte pour entrer en compétition avec celle du silicium amorphe. Or il a été montré que cette charge était atteinte pour des densités de défauts d'interface à partir de 10^{12} cm^{-2} [23], alors qu'expérimentalement ces densités ne dépassent pas quelques 10^{11} cm^{-2} pour les cellules permettant d'obtenir des efficacités de conversion entre 15% et 21%, et basées sur les hétérojonctions étudiées dans le cadre de cette thèse.

Nous commençons par extraire à partir de nos résultats expérimentaux la conductance dans le régime où le courant coplanaire d'obscurité varie linéairement avec la polarisation et la normalisons par la relation 4.1 afin de pouvoir comparer les différents échantillons.

$$G_{norm} = G \times \frac{L}{H} \quad (4.1)$$

où G est la conductance définie par $G = I/V$, L est l'espacement inter-électrodes, et H est la

TABLE 4.1 – Paramètres des matériaux à 300K.

		(p)c-Si	(p)a-Si:H	(i)a-Si:H
Énergie du gap	E_g (eV)	1.12	1.7	1.7
Affinité électronique	$q\chi$ (eV)	4.05	3.87	3.87
Permittivité relative	ε_r	11.9	11.9	11.9
Mobilité des électrons	μ_n ($cm^2.V^{-1}.s^{-1}$)	1500	20	20
Mobilité des trous	μ_p ($cm^2.V^{-1}.s^{-1}$)	500	4	4
Densité d'états effective dans la BC ¹	N_c (cm^{-3})	2.8×10^{19}	5×10^{20}	5×10^{20}
Densité d'états effective dans la BV ²	N_v (cm^{-3})	1.04×10^{19}	5×10^{20}	5×10^{20}

¹ Bande de conduction² Bande de valenceTABLE 4.2 – Paramètres représentant la répartition énergétique des défauts de type donneur et accepteur dans les gaps des différents types de a-Si:H. N_T et ω_T sont respectivement le préfacteur de l'exponentielle, et l'énergie caractéristique, modélisant la queue de bande. N_G et ω_G sont respectivement le maximum, et l'énergie du pic, de la distribution gaussienne. Pour plus de détails voir l'Annexe A. σ_e σ_h sont les sections efficaces de capture des électrons et de trous associées aux deux types de distributions.

		(i)a-Si:H		(p)a-Si:H	
		Donneur	Accepteur	Donneur	Accepteur
Queues	N_T ($cm^{-3}.eV^{-1}$)	1×10^{21}	1×10^{21}	2×10^{22}	2×10^{22}
	ω_T (eV)	0.043	0.026	0.060	0.034
de bandes	$\sigma_{T,e}$ (cm^2)	1×10^{-16}	1×10^{-17}	1×10^{-16}	1×10^{-17}
	$\sigma_{T,h}$ (cm^2)	1×10^{-17}	1×10^{-16}	1×10^{-17}	1×10^{-16}
Gaussiennes	N_G ($cm^{-3}.eV^{-1}$)	3×10^{15}	3×10^{15}	1.2×10^{20}	1.2×10^{20}
	ω_G (eV)	0.19	0.19	0.19	0.19
	E_G (eV)	0.60	0.80	1.25	0.25
	$\sigma_{G,e}$ (cm^2)	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}
	$\sigma_{G,h}$ (cm^2)	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}
Dopage	N_a, N_d (cm^{-3})	-		5.9×10^{19}	
Energie d'activation	E_a (eV)	0.85		0.39	

hauteur des électrodes.

La Figure 4-4a représente cette conductance normalisée en fonction de l'épaisseur de (i)a-Si:H pour les différents espacements inter-électrodes. Nous y avons ajouté la courbe issue de nos simulations avec les paramètres de défauts dans le (i)a-Si:H décrits dans la Table 4.2. Nous constatons d'une part que la conductance change peu entre les mesures avec des distances inter-électrodes (L) différentes pour un échantillon donné. D'autre part, la variation de (G_{norm}) simulée ne reproduit

pas les résultats expérimentaux. En effet, les paramètres de défauts utilisés pour simuler (i)a-Si:H correspondent à un matériau de type bulk. Or, étant donné la faible épaisseur de cette couche dans nos échantillons et dans les cellules de type HIT en général, une partie de la chute de potentiel se fait dans le (i)a-Si:H ($V_{bi}^{(i)a-Si:H}$) qui n'est donc plus intrinsèque (Figure 4-3). La densité de défauts que nous avons mis dans cette couche ne correspond donc pas à celle nécessaire pour obtenir le niveau de Fermi réel d'après le modèle Defect-Pool. En toute rigueur, il faudrait paramétrer ces défauts en fonction de la variation de E_f dans la couche [93], mais dans une première approximation nous pouvons définir une densité de défauts effective et constante dans tout le (i)a-Si:H. Nous faisons donc varier la densité de défauts profonds, ou Dangling Bonds (N_{DB}), dans cette couche en faisant varier les paramètres N_{GA} et N_{GD} de la DOS (voir Annexe A) et comparons ces résultats de simulation avec les résultats expérimentaux sur la Figure 4-4b.

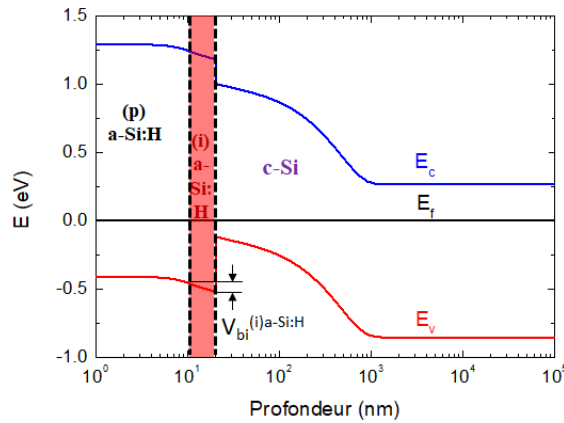
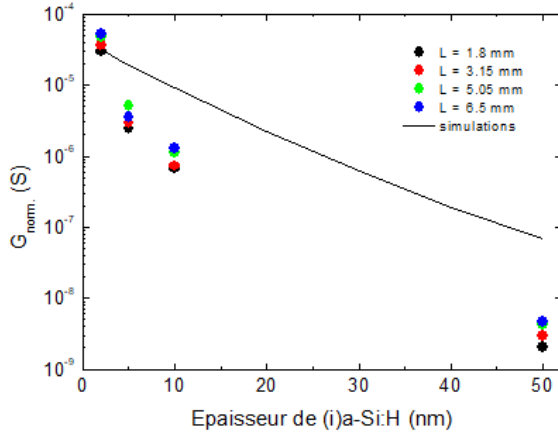
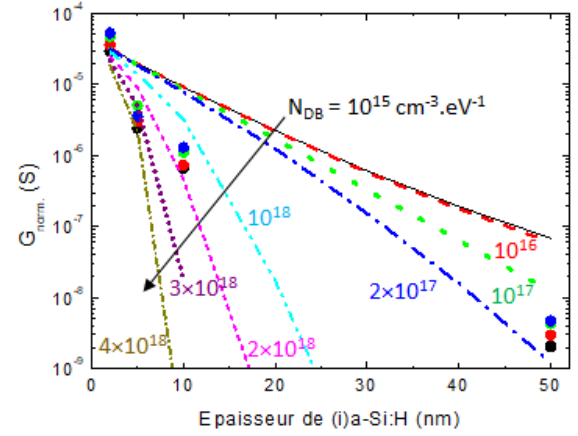


FIGURE 4-3 – Diagramme de bandes à l'équilibre de l'hétérojonction avec 10 nm de (i)a-Si:H. L'échelle des abscisses est logarithmique pour mieux visualiser l'interface. $V_{bi}^{(i)a-Si:H}$ représente la chute de potentiel dans le (i)a-Si:H.

Il est clair d'après ces résultats que la densité de défauts effective dans le (i)a-Si:H varie en fonction de son épaisseur, ce qui est très vraisemblable puisqu'une certaine épaisseur de matière est nécessaire pour que la croissance commence à se faire de manière homogène [94]. D'autre part, il peut être attendu que la mobilité des porteurs dans la zone d'inversion soit inférieure à celle du bulk c-Si en raison d'une concentration plus importante de porteurs, dans notre cas de trous. Or d'après la comparaison des résultats de simulations aux résultats expérimentaux (Figure 4-4b) nous voyons que la conductance simulée pour la plus faible épaisseur de (i)a-Si:H correspond à la conductance mesurée. Par conséquent, une mobilité plus faible à l'interface ne serait pas représentative de nos



(a)



(b)

FIGURE 4-4 – Variation de la conductance en fonction de l'épaisseur de (i)a-Si:H. (a) Mesures expérimentales pour les différents espacements inter-électrodes (L) et comparaison avec la simulation de l'hétérojonction avec un (i)a-Si:H de type bulk ($N_{DB} = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}.\text{eV}^{-1}$). (b) Mesures expérimentales et simulations de l'hétérojonction avec un (i)a-Si:H de N_{DB} variable allant de 1×10^{15} à $4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}.\text{eV}^{-1}$.

résultats expérimentaux pour cette épaisseur de (i)a-Si:H, ni pour les épaisseurs plus élevées. En effet, la concentration de trous à l'interface côté c-Si diminue avec l'augmentation de l'épaisseur, et donc leur mobilité se rapproche de celle du bulk.

Nous allons donc utiliser une mobilité de trous de $500 \text{ cm}^2.\text{V}^{-1}.\text{s}^{-1}$ [23] pour déterminer la courbure de bandes à l'interface de nos échantillons. Nous caractérisons celle-ci par la valeur de $E_f - E_v$ à l'interface (i)a-Si:H/(n)c-Si. Les points de la Figure 4-5 représentent la simulation de l'évolution de la conductance normalisée en fonction de $E_f - E_v$ à l'interface. Chaque symbole correspond à une épaisseur de (i)a-Si:H, et les différents points de chaque symbole correspondent aux différentes valeurs de N_{DB} de la Figure 4-4b. Nous avons superposé à ces simulations la courbe analytique 1D calculée à partir des relations données dans [23] et rappelées en Annexe B. Nous voyons alors que l'approximation 1D, i.e. un courant purement latéral, peut en effet être utilisée pour ces mesures coplanaires. Ces données nous permettent ensuite d'extraire les valeurs de $E_f - E_v$ correspondant aux conductances expérimentales et sont regroupées dans la Table 4.3.

Nous observons d'après ces résultats, que l'écart $E_f - E_v$ à l'interface augmente, comme attendu, avec l'épaisseur de (i)a-Si:H. De plus, compte tenu du fait que $E_c - E_f$ dans le bulk du silicium cristallin vaut 0.265 eV dans nos simulations, nous faisons l'hypothèse qu'il n'y a pas de zone d'inversion forte à l'interface pour l'échantillon avec 50 nm de (i)a-Si:H car $(E_f - E_v)_{int} > (E_c -$

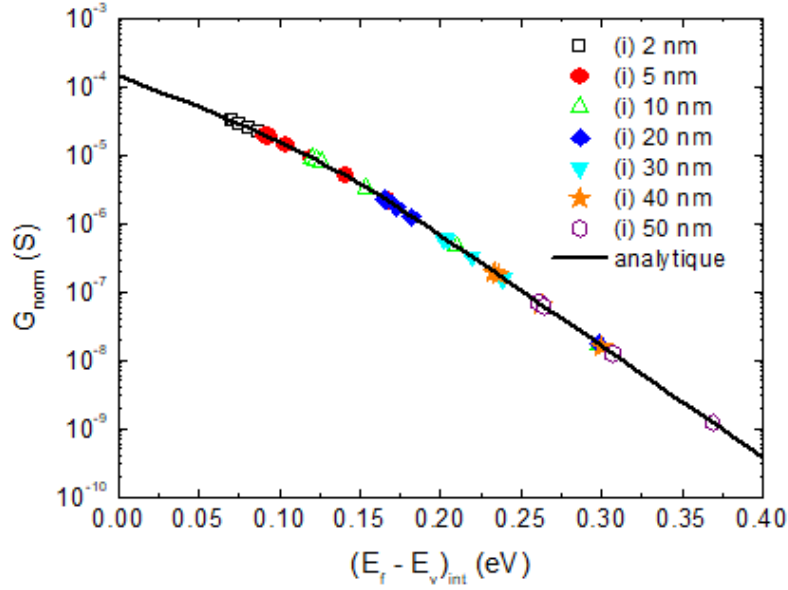


FIGURE 4-5 – Simulation de la variation de la conductance normalisée (G_{norm}) en fonction de la valeur $E_f - E_v$ à l'interface. Chaque symbole correspond à une épaisseur de (i)a-Si:H, et les différents points de chaque symbole correspondent aux différentes valeurs de N_{DB} de la Figure 4-4b. La courbe noire représente le calcul analytique 1D décrit dans l'Annexe B [23].

TABLE 4.3 – Valeurs de $E_f - E_v$ déterminées par correspondance entre les conductances expérimentales et simulées, et densité effective de défauts profonds du (i)a-Si:H associée.

Épaisseur de (i)a-Si:H (nm)	G_{norm} (S)	$E_f - E_v$ (eV)	N_{DB} ($cm^{-3}.eV^{-1}$)
2	3.0×10^{-5}	0.071	$2 \times 10^{17} - 4 \times 10^{18}$
5	2.4×10^{-6}	0.167	4×10^{18}
10	6.6×10^{-7}	0.210	2×10^{18}
50	2.0×10^{-9}	0.369	2×10^{17}

$E_f)_{bulk}$ (voir Tableau 4.3). D'autre part nous observons que la valeur de N_{DB} , permettant de simuler les valeurs de $E_f - E_v$ pour chaque épaisseur de (i)a-Si:H, diminue lorsque l'épaisseur de (i)a-Si:H augmente entre 5 et 50 nm. En revanche, il est difficile d'extraire une valeur de N_{DB} pour 2 nm de (i)a-Si:H car nous voyons sur la Figure 4-4b que la variation de N_{DB} pour cette épaisseur n'a que très peu d'influence sur la conductance, d'où la grande incertitude sur la valeur de N_{DB} . En effet, lorsque l'épaisseur de la couche de passivation est très faible, il n'y a quasiment pas de chute de potentiel en son sein. Par conséquent le niveau d'inversion à l'interface n'est régi que par les propriétés du (p)a-Si:H et du c-Si.

Expérimentalement, la technique de conductance planaire permet également d'estimer $E_f - E_v$

en déterminant l'énergie d'activation de la conductance sur un graphe d'Arrhenius (voir chapitre 3). Les correspondances entre G_{norm} et $E_f - E_v$ déterminé expérimentalement sont représentés sur la Figure 4-6a où elles sont superposées à la courbe analytique.

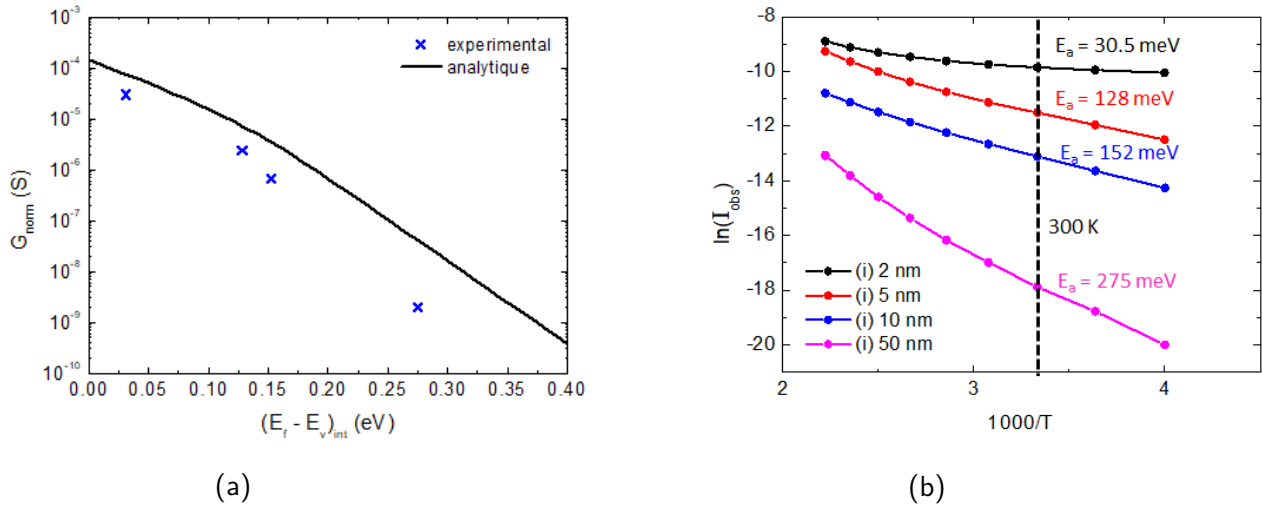


FIGURE 4-6 – (a) Variation expérimentale de la conductance en fonction de $E_f - E_v$ à l'interface (croix) et comparaison avec la courbe analytique (ligne). (b) Diagrammes d'Arrhenius expérimentaux et estimation de $(E_f - E_v)_{int}$ à partir de l'énergie d'activation du courant d'obscurité autour de 300 K ($V = 1V$).

Nous voyons un écart entre les courbes expérimentales et théoriques qui se creuse avec l'augmentation de l'épaisseur de (i)a-Si:H (augmentation de $(E_f - E_v)_{int}$). Cet écart peut s'expliquer par plusieurs éléments de réponse. D'une part, comme nous pouvons le voir sur les diagrammes d'Arrhenius (Figure 4-6b), il est difficile d'extraire une énergie d'activation autour de 300 K car il n'y a pas de région linéaire sur une large gamme de température. D'autre part, comme nous l'avons vu au chapitre 3, cette énergie d'activation correspond à l'écart $E_f - E_v$ à $T = 0$ K et non 300 K. Nous ne pouvons donc pas être certains de la valeur de $E_f - E_v$ estimée de cette façon. D'ailleurs l'écart observé entre les mesures et les simulations montrent bien que nous sous-estimons la valeur de $(E_f - E_v)_{int}$. Nous utiliserons donc pour la suite les valeurs théoriques de $(E_f - E_v)_{int}$ déterminées par les valeurs expérimentales de conductance.

Maintenant que nous avons caractérisé la courbure des bandes à l'interface entre le (i)a-Si:H et le silicium cristallin par l'intermédiaire de la grandeur $E_f - E_v$, nous nous intéressons au phénomène qui induit un changement de régime dans la caractéristique courant-tension observée expérimentalement. Nous simulons donc cette caractéristique pour les différents échantillons avec les valeurs de

$E_f - E_v$ déterminées précédemment. Les résultats de ces simulations sont représentés sur la Figure 4-7 et comparés aux mesures expérimentales. Pour cela nous avons normalisé le courant de la même façon que pour la conductance ($I_{norm} = I \times L/H$).

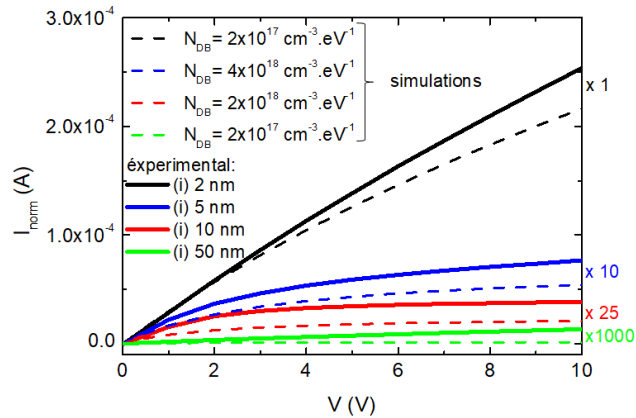


FIGURE 4-7 – Courbes $I(V)$ en géométrie coplanaire. Les lignes pleines correspondent aux simulations et celles en pointillés correspondent aux mesures.

Nous remarquons que, similairement aux résultats expérimentaux, les simulations montrent un changement de régime entre les faibles et les plus fortes polarisations. Ce dernier est d'ailleurs plus prononcé dans les simulations puisqu'il a lieu à une polarisation plus faible ($V \approx 0.4 \text{ V}$) qu'expérimentalement ($V \approx 1 \text{ V}$). Pour comprendre cet effet nous représentons la répartition de la densité de courant d'obscurité (J) dans la structure avec l'épaisseur de (i)a-Si:H de 10 nm pour une polarisation de chaque régime: 100 mV (Figure 4-8a) et 10 V (Figure 4-8b).

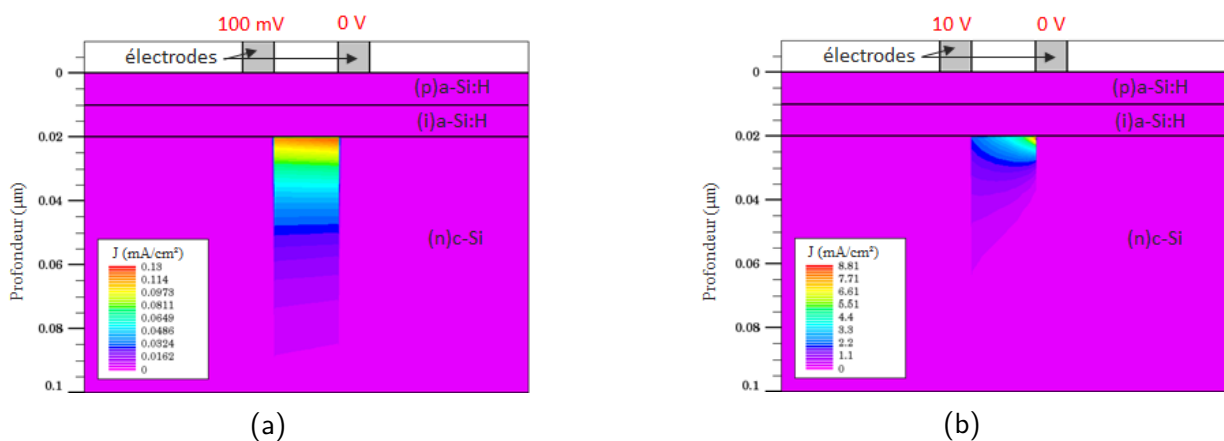


FIGURE 4-8 – Cartographie 2D de la densité de courant de conduction pour une tension appliquée entre les électrodes de (a) 100 mV et (b) 10 V.

Nous constatons d'après ces figures que d'une part le courant extrait par les électrodes provient

bien de la région du c-Si proche de l'interface, et que d'autre part, contrairement au régime des faibles polarisations où la densité de courant reste homogène sur toute la distance inter-électrodes pour une profondeur donnée (Figure 4-8a), celle à forte polarisation est très hétérogène (Figure 4-8b) et se concentre majoritairement au niveau de la cathode (électrode non polarisée). Regardons alors ce qu'il se passe au niveau de $E_f - E_v$ pour ces deux cas (Figure 4-9). Nous y avons également ajouté une valeur intermédiaire de polarisation: 1 V.

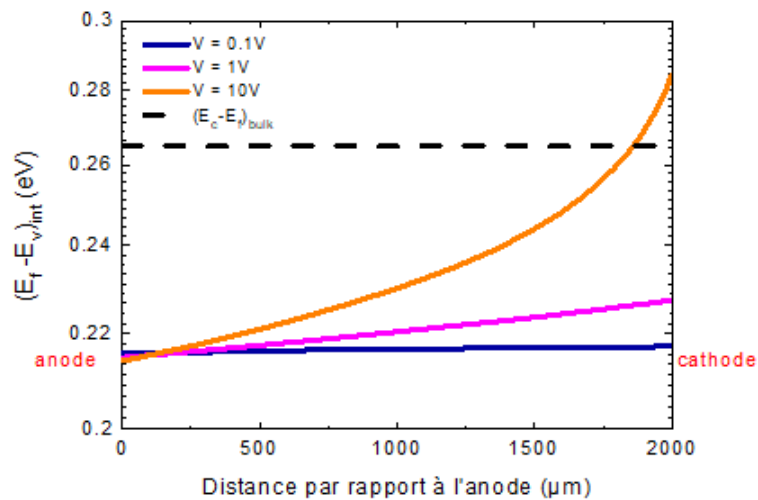


FIGURE 4-9 – Évolution entre les deux électrodes de $E_f - E_v$ à l'interface entre (i)a-Si:H/c-Si pour plusieurs polarisations (bleu: 100 mV, rose: 1 V, et orange: 10 V). La droite en pointillés représente l'écart $E_c - E_f$ dans le bulk du c-Si.

On observe ainsi que, pour les faibles polarisations (par exemple $V = 0.1$ V), l'écart $E_f - E_v$ reste quasi constant. Le canal de conduction ainsi que son épaisseur sont alors maintenus sur toute la distance entre les deux électrodes. Le courant collecté par les électrodes correspond à la conductivité de ce canal, et dépend donc linéairement de la tension appliquée. En revanche, pour les fortes polarisations, l'écart $E_f - E_v$ augmente avec la distance par rapport à l'électrode de gauche (anode). Cela a pour effet de réduire le canal de conduction au fur et à mesure que l'on se rapproche de la cathode. On voit même une disparition de la zone d'inversion forte à 10 V lorsque $(E_f - E_v)_{int} > (E_c - E_f)_{bulk}$. Cette caractéristique rappelle celle des transistors à effet de champ de type MOSFET où l'application d'une tension de grille crée un canal de conduction, et à partir d'une certaine tension appliquée entre le drain et la source, il se crée un pincement du canal de conduction (Figure 4-10a) et donc une saturation du courant (Figure 4-10b). Dans le cas de l'hétérojonction nous n'avons pas de grille, mais le canal de conduction (zone d'inversion) est créé par l'hétérojonction. Ainsi, à partir

d'une certaine tension appliquée entre les électrodes coplanaires nous observons le même pincement de canal que dans un transistor à effet de champ.

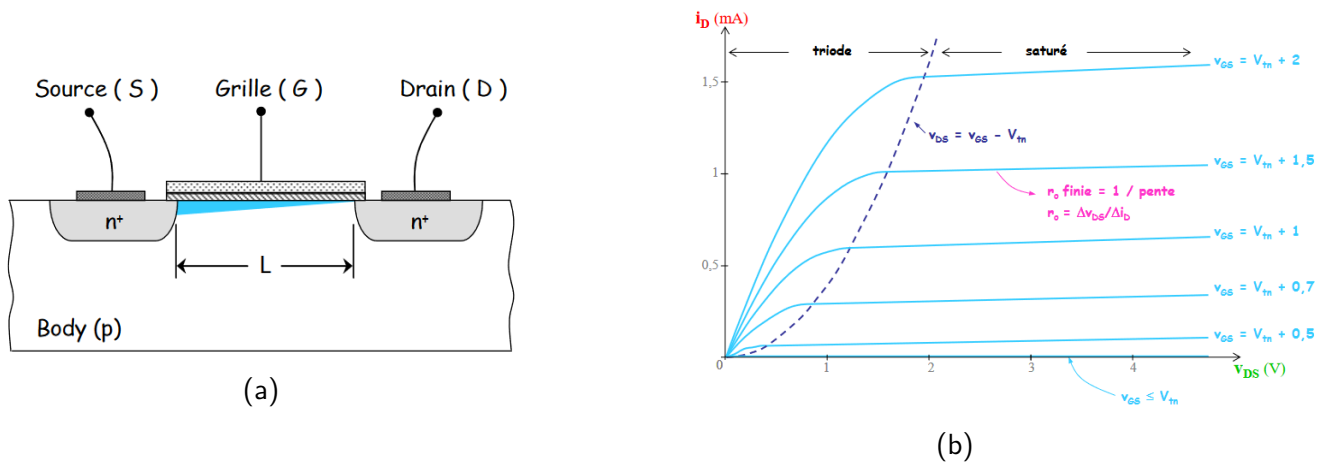


FIGURE 4-10 – (a) Représentation schématique du pincement de canal dans un transistor MOSFET et (b) caractéristique courant-tension [95].

L'objectif de cette partie de la thèse étant d'étudier les propriétés d'interface, nous nous placerons pour la suite de l'étude électrique dans le régime linéaire, c'est à dire où le courant circule prioritairement proche de cette interface.

Grâce aux mesures de conductance coplanaire nous avons caractérisé le niveau d'inversion de chaque échantillon en terme de valeur de $(E_f - E_v)$ à l'interface. Nous allons maintenant compléter cette étude par des mesures réalisées avec des techniques en régime modulé: la PhotoLuminescence et le PhotoCourant Modulés.

4.2 Couplage des techniques de PhotoCourant (MPC) et PhotoLuminescence Modulées (MPL) pour l'étude de l'interface c-Si/a-Si:H

Comme nous l'avons vu au chapitre 3, la technique de PhotoLuminescence Modulée (MPL) est largement utilisée pour étudier la qualité de passivation de wafers de silicium cristallin. Nous allons donc l'utiliser pour caractériser nos hétérojonctions en terme de densité de défauts d'interface. Nous couplerons cette technique avec celle du PhotoCourant Modulé (MPC) afin d'étudier son application au cas de l'hétérojonction. En effet nous avons vu que la MPC permet de caractériser la densité

d'états de défauts (DOS) dans le gap de matériaux amorphes de type bulk. Ici, nous utilisons cette technique dans l'objectif de caractériser la DOS d'interface dans le silicium cristallin.

Avant de présenter nos résultats de mesures, nous commençons par décrire le banc expérimental où nous avons couplé les techniques MPL et MPC.

4.2.1 Description du banc expérimental

Le banc expérimental consiste en un couplage des trois techniques suivantes: photoluminescence, conductance planaire et photocourant. Le couplage de ces techniques a été réalisé dans le cadre de cette thèse afin de pouvoir effectuer les trois types de mesures dans les mêmes conditions.

Initialement, deux bancs indépendants: un de MPC et un de MPL, existaient au laboratoire. Dans le cadre de cette thèse nous avons ré-utilisé le banc MPL et l'avons modifié pour pouvoir également y réaliser des mesures de MPC et de conductance planaire. Sur le banc initial de MPL (représenté sur la Figure 4-11), l'échantillon à analyser est placé soit sur des platines mobiles soit dans le cryostat selon si l'expérimentateur souhaite faire des mesures en température ou un balayage de photoluminescence. Un laser modulable de 785 nm de longueur d'onde, alimenté en continu par une source de courant et en alternatif par une source de tension, est envoyé dans une fibre optique et éclaire l'échantillon. La taille du spot lumineux à la surface de l'échantillon est d'environ 1 cm. Pour collecter la photoluminescence un miroir parabolique est placé au dessus de l'échantillon. Le flux collecté est ensuite collimaté et focalisé à l'aide de lentilles convergentes vers un monochromateur qui permet de sélectionner la longueur d'onde à analyser.

Une photodiode rapide en InGaAs est placée en sortie du monochromateur pour convertir le signal lumineux en un courant électrique. Sa surface photosensible est de 2mm^2 . Dans le cas d'une mesure de photoluminescence continue (PL), la valeur du courant est directement lue sur un multimètre. Pour une mesure de photoluminescence modulée (MPL), le courant issu de la photodiode est envoyé vers un pré-amplificateur qui lui associe un gain en le convertissant en tension. Cette tension est mise en entrée d'une détection synchrone qui relève l'amplitude du signal et son déphasage par rapport à la tension de modulation envoyée à la diode laser. Le balayage en fréquence ainsi que la collecte des résultats expérimentaux est assuré par un programme Labview. Celui-ci permet également de (i) déplacer les platines par un pas défini par l'utilisateur et relever leur position s'il souhaite effectuer un balayage spatial de PL ou MPL, (ii) de contrôler le régulateur de température dans le cryostat, et (iii) d'appliquer la tension de modulation au laser par le biais d'une sortie de

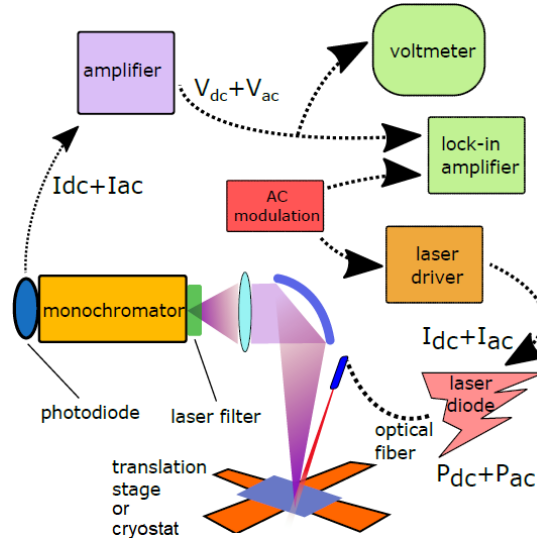


FIGURE 4-11 – Représentation schématique du banc initial de MPL [75].

la détection synchrone.

Afin de coupler les techniques de conductance planaire et de photocourant modulé à la photoluminescence modulée, un système permettant de prendre des contacts au niveau du cryostat a été réalisé. Il consiste en deux pointes chacune disposée sur une base aimantée et que l'utilisateur peut déplacer sur un support métallique autour du porte-échantillon (cf. Figure 4-12). Ainsi une extrémité de chaque pointe est placée sur l'échantillon et l'autre est reliée soit à la masse soit à une sortie du cryostat. Cette sortie permet la mesure du courant d'obscurité, photocourant (PC) ou photocourant modulé (MPC). Pour les deux premiers types de mesures la sortie du cryostat est connectée à un ampère-mètre électronique, alors que pour la mesure de MPC nous avons rajouté un second dispositif {pré-amplificateur + détection synchrone}. Pour les trois types de mesures une source de tension permet d'appliquer une polarisation entre les électrodes. La Figure 4-13 représente le schéma complet du dispositif expérimental.

Le programme Labview a également été adapté de sorte à ce que l'utilisateur puisse effectuer (i) des mesures de conductance à l'obscurité et sous la lumière du laser, (ii) des courbes $I(V)$ à l'obscurité et sous lumière, (iii) des mesures de PL ou MPL, (iv) des mesures de MPC, et (v) des mesures simultanées de MPL et de MPC. Par simultanées, il est sous-entendu que les mesures sont effectuées directement l'une à la suite de l'autre pour chaque fréquence d'excitation.

Concernant la partie optique, un porte-filtres a été placé en sortie de fibre optique afin d'étendre la gamme de flux disponibles. En effet la diode laser étant contrôlée par un courant, le flux est

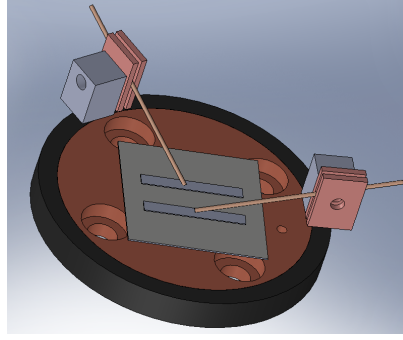


FIGURE 4-12 – Représentation schématique du support de pointes conçu.

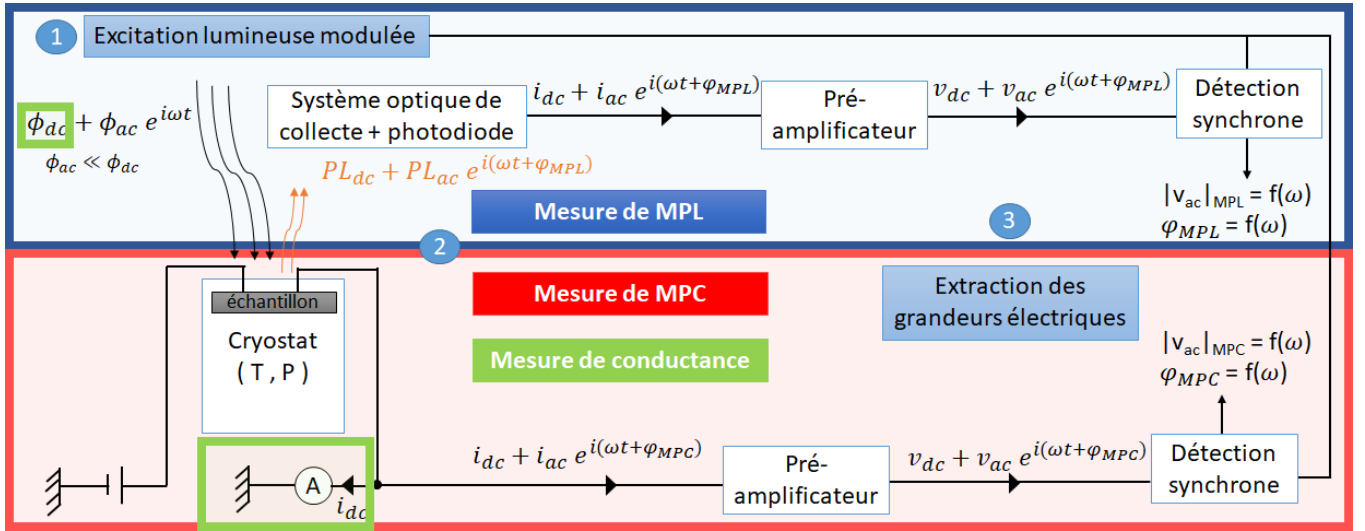


FIGURE 4-13 – Représentation schématique du dispositif expérimental complet. L'encadré bleu correspond à la MPL, le rouge à la MPC, et le vert à la conductance. Dans le cas de la conductance l'excitation lumineuse est continue.

limité par la zone de linéarité dans lequel l'effet laser a lieu. Rajouter des filtres à densité neutre permet donc de descendre à plus bas flux, tout en s'assurant de rester dans le régime linéaire du laser. De plus, pour nos mesures de MPL, nous avons enlevé le monochromateur afin d'intégrer sur la photodiode tout le signal de photoluminescence.

Pour les mesures en fréquence il est nécessaire d'effectuer un étalonnage afin de soustraire le déphasage provenant du système électronique. L'étalonnage de la MPL s'effectue en plaçant à la place de l'échantillon un réflecteur, et pour la MPC une photodiode en silicium calibrée. La Figure 4-14 montre l'étalonnage en déphasage de la MPL et de la MPC. L'étalonnage en flux est effectué à l'aide d'un puissance-mètre laser calibré en longueur d'onde (OPHIR Nova II).

Après avoir monté et étalonné le dispositif expérimental, on y place un échantillon test afin de comparer les résultats de conductivité et de MPC avec ceux mesurés avec un autre banc MPC

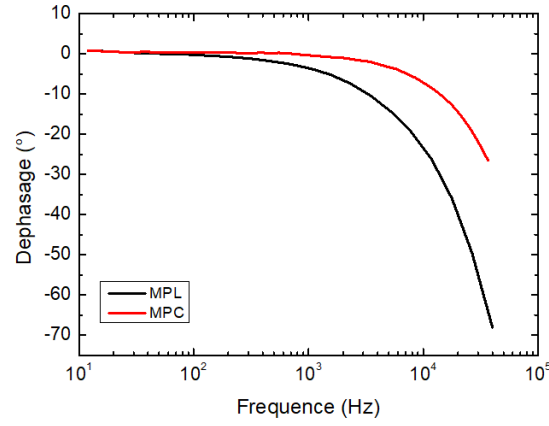


FIGURE 4-14 – Courbes d'étalonnage en déphasage de la MPC (rouge, gain de l'amplificateur: 10^5) et de la MPL (noir, gain de l'amplificateur: 10^7).

existant au laboratoire et pour les mêmes conditions d'éclairement (mêmes source et flux). Ces résultats sont représentés sur la Figure 4-15. La température utilisée ne dépasse pas 310 K car le cryostat du banc MPL initial n'est pas adapté aux montées de température.

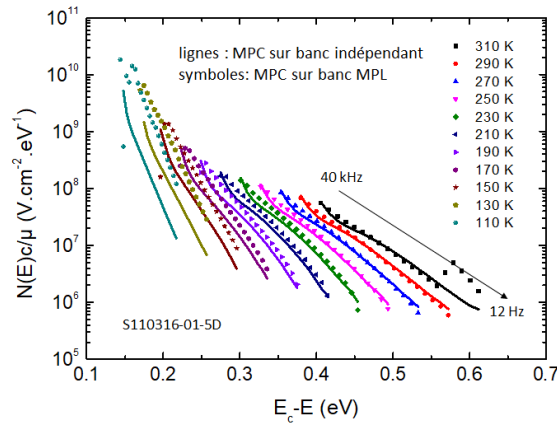


FIGURE 4-15 – Rapport $\frac{cN}{\mu}$ déterminé à partir des mesures de MPC en fréquence et en température pour un échantillon de silicium amorphe (S110316-01-5D) sur le nouveau banc MPC/MPL (symboles) et comparé aux mesures réalisées sur un autre banc indépendant de MPC (lignes).

On peut voir d'après cette figure que les résultats obtenus avec les deux bancs concordent à température ambiante, mais en descendant en température un léger écart s'installe. Notamment, prenons l'exemple des deux courbes à 190 K, on peut voir que les mesures à basse fréquence concordent pour les deux bancs alors qu'à hautes fréquences la courbe de MPC sur banc indépendant rejoint celle à 170 K du banc MPC/MPL. Nous en concluons que l'échantillon, lorsqu'il est placé sur le banc

MPC indépendant, n'est pas à la bonne température au début de la mesure (à 12 Hz) puisqu'il atteint la température désirée vers la fin de la mesure en fréquence (170 K). Cela peut s'expliquer par la différence de mise en place de l'échantillon dans le cryostat: sur la banc couplé MPC/MPL les pertes thermiques doivent être plus faibles ce qui permet à l'échantillon d'atteindre plus rapidement la température désirée.

Maintenant que le montage du banc expérimental est validé et qu'il a été étalonné pour déduire le déphasage propre au système électrique en fonction de la fréquence, nous allons présenter nos résultats de mesures.

4.2.2 Mesures de PhotoLuminescence Modulée

Comme décrit dans le chapitre 3, les mesures de MPL sont largement utilisées pour estimer la vitesse de recombinaison à l'interface entre le silicium cristallin et sa couche de passivation, et ont également été appliquées au cas de cellules à hétérojonction de silicium. Afin de compléter nos résultats de conductance coplanaire nous réalisons donc des mesures de MPL sur nos échantillons en fonction du flux incident et donc de l'injection de porteurs. Pour commencer nous avons réalisé les mesures MPL sur des quarts de wafers avant dépôt des électrodes coplanaires et clivage afin d'adapter leur taille aux dimensions du porte-échantillons dans le cryostat permettant de réaliser les mesures électriques. La durée de vie différentielle effective des porteurs minoritaires (τ_{MPL}) dans le bulk cristallin est extraite à partir du déphasage mesuré par la détection synchrone selon la relation $\varphi_{MPL} = -\arctan(\omega\tau_{MPL})$ (cf. chapitre 3) que l'on peut ré-écrire sous la forme $\tau_{MPL} = -\tan(\varphi_{MPL})/(\omega)$. En traçant $\tan(\varphi)$ en fonction de ω on obtient une droite (Figure 4-16b) dont la valeur absolue du coefficient directeur est directement la valeur de τ_{MPL} .

4.2.2.1 Mesures MPL sur les quarts de wafers

La Figure 4-17 représente l'évolution de τ_{MPL} en fonction de la concentration de porteurs minoritaires en excès, ici les trous Δp (ou taux d'injection). Ces points expérimentaux correspondent à une moyenne de la durée de vie mesurée en douze points de l'échantillon (six sur une face, six sur l'autre face). Le taux d'injection est calculé par la relation $\Delta p = G \times \tau_{MPL}$ où G est le taux de génération moyen dans le c-Si et estimé à partir du flux laser par la relation $G = (1 - R)\phi_0/d_{c-Si}$ où d_{c-Si} est l'épaisseur du silicium cristallin et vaut $150 \mu m$, et R est le coefficient de réflexion. Ce dernier varie généralement entre 0,8 et 1 pour du silicium cristallin passivé. Nous prendrons donc

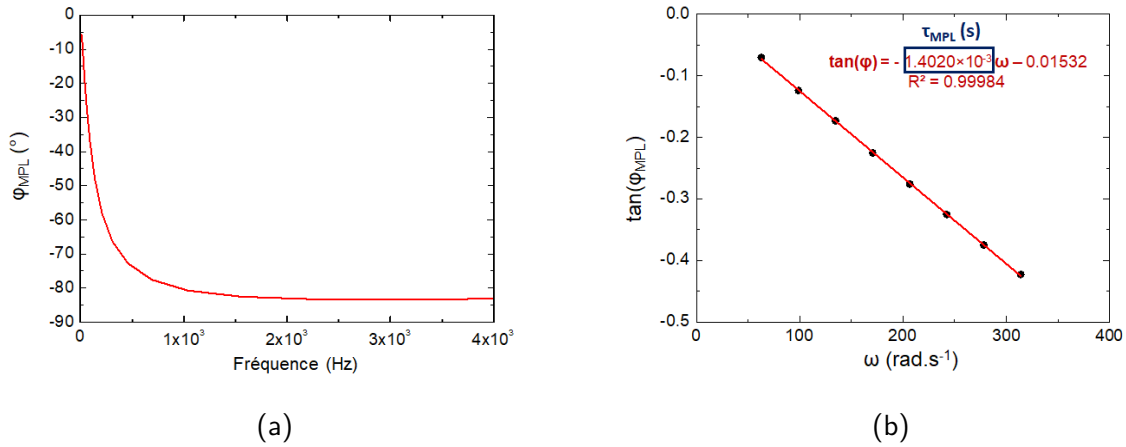


FIGURE 4-16 – Exemple d'extraction de la durée de vie à partir d'une mesure de MPL.

la valeur moyenne de 0,8 qui est la valeur habituellement utilisée. Le flux incident ϕ_0 est calculé à partir de la valeur mesurée par le puissance-mètre pour un spot de $0,9 \pm 0,1$ mm de diamètre par la relation $\phi_0 = P / \pi r^2 \times \lambda / hc$, avec P la puissance mesurée, r le rayon du spot, λ la longueur d'onde du laser (785 nm), h la constante de Planck, et c la célérité de la lumière.

L'incertitude liée à la valeur de τ_{MPL} est déterminée par la statistique (écart-type) sur les douze points de mesure. La pente à basse fréquence pour chacune de ces mesures est déterminée avec un coefficient de régression supérieur à 0,99. L'incertitude sur Δp est calculée à partir des incertitudes sur τ_{MPL} et G par la relation: $\delta(\Delta p) / \Delta p = (\delta \tau_{MPL} / \tau_{MPL}) + (\delta G / G)$. δG est déterminé par les incertitudes sur le coefficient de réflexion et sur le diamètre (et donc le rayon) du spot étant donné son profil gaussien. On a alors: $\delta G / G = \delta R / R + 2\delta r / r$, avec $\delta R = 0.1$ et $\delta r = 0.5$ mm.

Nous voyons d'après ces premiers résultats que la durée de vie de nos échantillons est d'autant plus grande que l'épaisseur de (i)a-Si:H augmente (échantillons (i) 2 nm à (i) 50 nm). Celle de (i) 0 nm, dont l'épaisseur de (i)a-Si:H doit être nulle, semble avoir une durée de vie légèrement plus grande que celle de (i) 2 nm. Sur ces courbes nous voyons également qu'en régime de faible injection (faibles valeurs de Δp) la durée de vie MPL converge vers une valeur fixe pour chaque échantillon. En revanche, pour les plus fortes injections, τ_{MPL} décroît. Cette décroissance est caractéristique de la recombinaison Auger qui domine aux fortes injections. Dans le cadre de cette thèse nous étudierons uniquement le régime des faibles injections, où la recombinaison est dominée par le mécanisme SRH. Les durées de vie SRH extraites pour chaque quart de wafer (avant clivage) sont regroupées dans la Table 4.4.

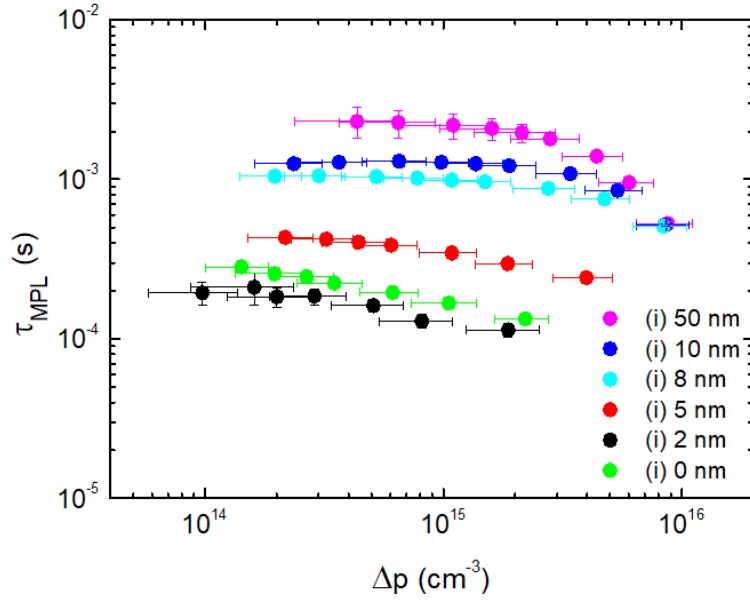


FIGURE 4-17 – Résultats de la variation de la durée de vie extraite des mesures de MPL (τ_{MPL}) sur les quarts de wafers en fonction du taux d'injection (Δp).

4.2.2.2 Comparaison avec les mesures de PCD (Sinton)

Nous allons maintenant comparer ces résultats aux mesures de Déclin de PhotoConductance (PCD) réalisées avec l'appareil Sinton WCT-120. Le principe de cette mesure et la méthode d'extraction de la durée de vie sont décrites dans l'Annexe C. La Figure 4-18 représente les résultats de la variation de la durée de vie en fonction de l'injection pour les deux techniques de mesure. Les résultats de PCD sont issus d'une moyenne sur trois flashes par échantillon et ont été réalisés à deux reprises à des jours différents.

Nous observons sur cette figure que la durée de vie extraite par PCD est supérieure à celle mesurée par MPL pour les échantillons (i) 8 nm à (i) 50 nm. Il est connu que la technique PCD peut présenter des artefacts de mesure à faible injection qui peuvent provenir de l'un des deux effets physiques suivants: (i) un stockage de charges mobiles aux bornes de la zone de charge d'espace [96, 97] ou (ii) une capture des porteurs minoritaires par des défauts peu recombinants [98]. Ces artefacts résultent en une surestimation de la durée de vie effective mesurée et peuvent expliquer le fait que la durée de vie déterminée par MPL soit inférieure à celle obtenue par PCD. En revanche, les durées de vies des échantillons (i) 0 nm à (i) 5 nm estimées par les deux techniques sont très proches. Les valeurs de τ_{PCD} extraites pour $\Delta p = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ sont également regroupées dans la

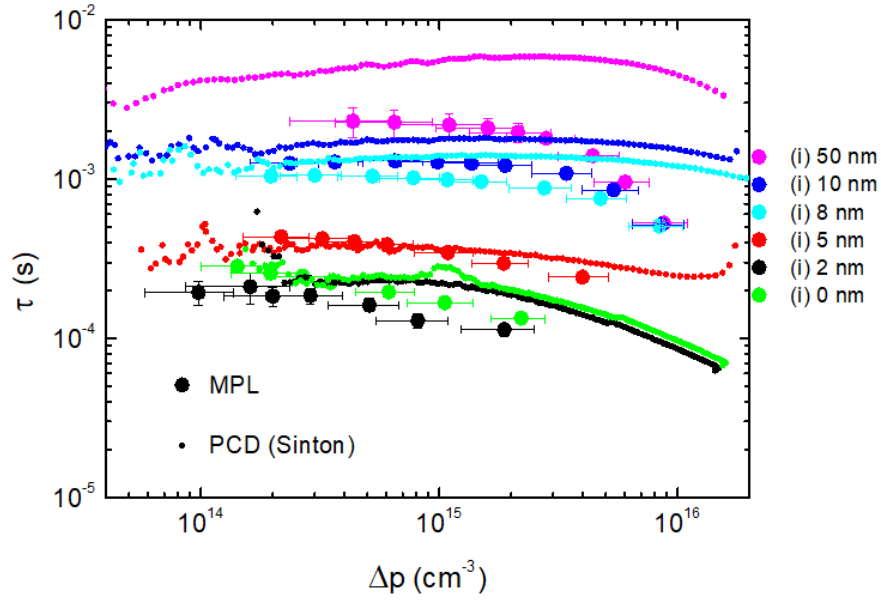


FIGURE 4-18 – Comparaison MPL vs. PCD (Sinton).

Table 4.4.

4.2.2.3 Mesures MPL sur les échantillons clivés

Nous réalisons de nouveau les mesures MPL suite au dépôt des électrodes coplanaires et clivage des échantillons. Compte tenu des nouvelles dimensions des échantillons et la taille du spot, nous n'avons réalisé qu'un seul point de mesure par échantillon sur la face vierge (sans électrodes). Ces nouveaux résultats sont représentés sur la Figure 4-19 où ils sont comparés aux mesures précédentes. Nous n'avons pas réalisé de nouvelles mesures de PCD car nos échantillons sont à présent plus petits que la taille requise par l'appareil Sinton WCT-120 pour que la mesure soit fiable.

Nous voyons sur cette figure que τ_{MPL} des échantillons (i) 2 nm et (i) 5 nm ont peu varié. En revanche la durée de vie des échantillons (i) 10 nm et (i) 50 nm a légèrement diminué. Cela peut s'expliquer par le fait que le clivage a introduit des recombinaisons de surface supplémentaires. Nous le voyons de manière prononcée sur les échantillons ayant les plus grandes durées de vie, mais pour des durées de vie initialement plus faibles ces recombinaisons supplémentaires n'influencent pas le résultat final. Nous pouvons également remarquer que la durée de vie de l'échantillon (i) 2 nm semble plus élevée après clivage. Mais cela peut s'expliquer par le fait que nous n'avons effectué qu'une seule mesure étant donné la taille de l'échantillon clivé, alors que pour la mesure sur les

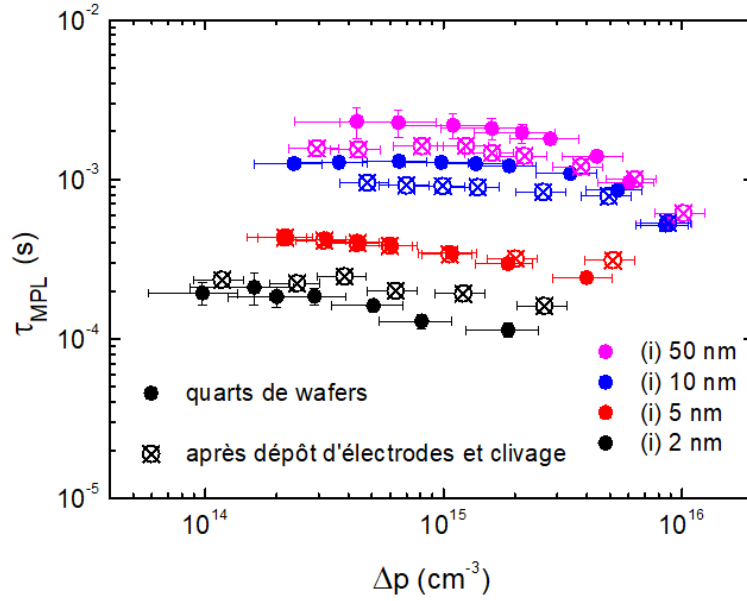


FIGURE 4-19 – Résultats de la variation de la durée de vie (τ) extraite des mesures de MPL sur les échantillons après dépôt d'électrodes et clivage en fonction du taux d'injection (Δp). Ils sont comparés aux résultats précédents sur les quarts de wafers.

quarts de wafers nous avons moyenné nos résultats. Ces nouvelles valeurs de τ_{MPL} (après clivage) sont ajoutées à la Table 4.4 ci-dessous.

TABLE 4.4 – Récapitulatif des durées de vie des porteurs minoritaires dans les échantillons du lot INES 2600 déterminées par les mesures de PCD et MPL à faible injection avant et après clivage.

Échantillon	τ_{MPL} (ms) avant clivage	τ_{PCD} (ms) ¹ avant clivage	τ_{MPL} (ms) après clivage
(i) 50 nm	2.31 ± 0.5	5.58	1.57
(i) 10 nm	1.26 ± 0.1	1.79	0.953
(i) 8 nm	1.05 ± 0.05	1.4	-
(i) 5 nm	0.433 ± 0.03	0.358	0.431
(i) 2 nm	0.194 ± 0.033	0.222	0.234
(i) 0 nm	0.283 ± 0.016	0.240	-

¹ $\Delta p = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$

4.2.2.4 Simulation de la technique MPL

La mesure de MPL permet de comparer la qualité de passivation d'interface de nos échantillons, mais pour déterminer la vitesse de recombinaison des porteurs à l'hétérojonction il est nécessaire d'avoir recours à un modèle. A cet effet nous réalisons des simulations numériques de MPL en 2D

avec ATLAS. Pour simuler l'amplitude et le déphasage en fonction de la fréquence nous procédons comme suit: en régime modulé l'intensité de la photoluminescence (I^{PL}) varie en fonction du temps (t) comme le taux de photogénération selon la loi:

$$G(t) = G_{DC} + G_{AC}e^{i\omega t} \quad (4.2)$$

$$I^{PL}(t) = I_{DC}^{PL} + I_{AC}^{PL}e^{i\omega t} \quad (4.3)$$

avec G_{DC} , I_{DC}^{PL} les composantes continues et G_{AC} , I_{AC}^{PL} les composantes alternatives du taux de photogénération et de l'intensité PL respectivement. ω est la pulsation du signal reliée à la fréquence f par $\omega = 2\pi f$.

Comme vu au chapitre précédent, cette intensité correspond au taux de recombinaison radiatif qui est directement proportionnel au produit des concentrations d'électrons (n) et de trous (p). Pour calculer l'intensité PL, nous intégrons donc le produit $n(x, y)p(x, y)$ sur les dimensions de la structure simulée (voir Figure 3-2), l'origine des y étant prise à la jonction entre le a-Si:H et le c-Si :

$$I^{PL}(t) \propto \iint_{x,y} n(x, y, t)p(x, y, t)dx dy \quad (4.4)$$

avec $n(t) = n_{DC} + n_{AC}e^{i\omega t}$ et $p(t) = p_{DC} + p_{AC}e^{i\omega t}$, les variations des concentrations de porteurs dans le temps.

En ne gardant que le premier ordre du produit np nous obtenons:

$$n(t)p(t) \approx n_{DC}p_{DC} + (n_{DC}p_{AC} + p_{DC}n_{AC})e^{i\omega t} \quad (4.5)$$

Puis, par identification entre les équations 4.3 et 4.5 on peut exprimer les parties continue et alternative de l'intensité de photoluminescence:

$$I_{DC}^{PL} \propto n_{DC}p_{DC} \quad (4.6)$$

$$I_{AC}^{PL} \propto n_{DC}p_{AC} + p_{DC}n_{AC} \quad (4.7)$$

L'expression de la variation dans le temps de la partie alternative de l'intensité PL est donc la

suivante:

$$I_{AC}^{PL}(t) \propto (n_{DC}p_{AC}(t) + p_{DC}n_{AC}(t))e^{i\omega t} \quad (4.8)$$

Soit en fonction des parties réelle ($\Re$) et imaginaire ($\Im$) des concentrations de porteurs:

$$I_{AC}^{PL}(f) \propto n_{DC}[\Re(p_{AC})(f) + i\Im(p_{AC})(f)] + p_{DC}[\Re(n_{AC})(f) + i\Im(n_{AC})(f)] \quad (4.9)$$

Les parties réelle et imaginaire du signal de photoluminescence s'expriment alors:

$$\Re(I_{AC}^{PL})(f) \propto n_{DC}\Re(p_{AC})(f) + p_{DC}\Re(n_{AC})(f) \quad (4.10)$$

$$\Im(I_{AC}^{PL})(f) \propto n_{DC}\Im(p_{AC})(f) + p_{DC}\Im(n_{AC})(f) \quad (4.11)$$

Il en résulte les équations de l'amplitude et du déphasage MPL:

$$|I_{AC}^{PL}| \propto \sqrt{[\Re(I_{AC}^{PL})]^2 + [\Im(I_{AC}^{PL})]^2} \quad (4.12)$$

$$\varphi = -\arctan\left(\frac{\Im(I_{AC}^{PL})}{\Re(I_{AC}^{PL})}\right) \quad (4.13)$$

Les parties réelle et imaginaire des concentrations de porteurs sont calculés par ATLAS et extraites en fonction de leur position (x,y) et de la fréquence. Ces données sont ensuite entrées dans un programme Matlab que nous avons développé pour calculer l'équation 4.9 pour chaque triplet (x,y,f), puis de l'intégrer sur les dimensions de la structure 2D et finalement donner les résultats $|I_{AC}^{PL}|(f)$ et $\varphi(f)$ à partir des équations 4.10 à 4.13.

Pour tester ce modèle nous effectuons des simulations sur une structure composée d'un bulk de silicium cristallin. Nous nous plaçons dans le régime d'injection où la recombinaison SRH domine et comparons la durée de vie extraite par la pente à basse fréquence du déphasage avec la durée de vie des porteurs rentrée dans ATLAS à travers le défaut situé au midgap du silicium cristallin. Nous testons ainsi trois valeurs de durées de vie dans le bulk cristallin: 0.1 ms, 1 ms et 10 ms. Les résultats sont représentés sur la Figure 4-20a. Nous traçons ensuite le graphe $\tan \varphi = f(\omega)$ afin d'extraire la durée de vie issue de la modélisation de MPL (Figure 4-20b). Les valeurs obtenues

correspondent exactement aux durées de vie du bulk, ce qui nous permet de valider notre modèle.

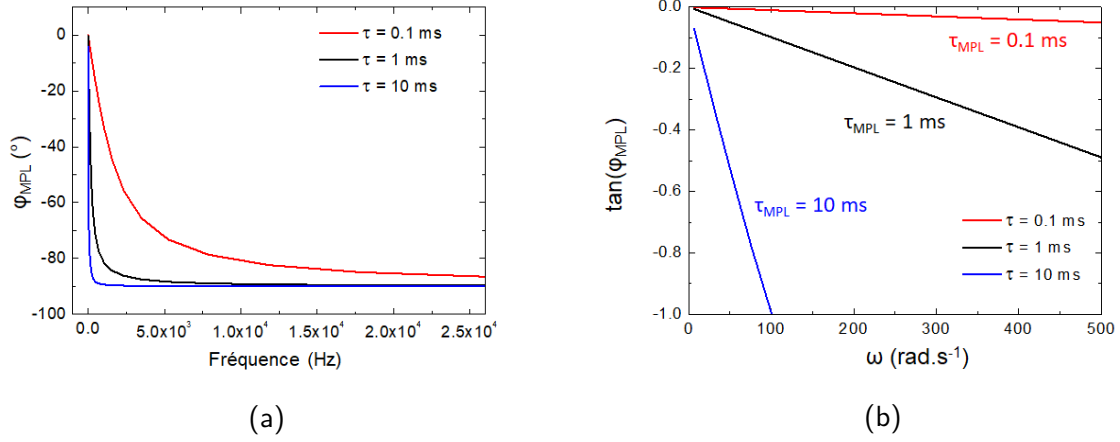


FIGURE 4-20 – Résultats de simulation MPL sur un bulk de silicium cristallin pour trois valeurs de durées de vie (rouge: 0.1 ms, noir: 1 ms, et bleu: 10 ms). (a) Courbe de l'évolution du déphasage en fonction de la fréquence et (b) $\tan \varphi = f(\omega)$.

4.2.2.5 Détermination de la densité de défauts d'interface

Nous faisons maintenant varier la densité de défauts d'interface (D_{it}) pour une durée de vie du bulk de 1 ms. Nous modifions donc le premier nanomètre de silicium cristallin adjacent au a-Si:H. Ce dernier possède les mêmes propriétés que le c-Si sauf qu'au lieu du défaut midgap nous lui imposons une densité de défauts (N (cm^{-3})) constante sur toute la gamme d'énergie du gap et de section efficace de capture (σ) de 10^{-14} cm^2 (valeur typique pour un défaut de type liaison brisée). La valeur de D_{it} est donc calculée par la relation $D_{it} = N \times d$, où d est l'épaisseur de la couche (1 nm). Les résultats de variation du déphasage (φ) en fonction de la fréquence et de D_{it} sont représentés sur la Figure 4-21a. Nous pouvons y constater que pour $D_{it} < 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, les défauts d'interface n'influent pas le résultat MPL. Cela s'explique par le fait que la photoluminescence provient de tout le bulk. Par conséquent, la PL émise proche de l'interface ne représente qu'une infime partie de la PL totale. Nous pouvons d'ailleurs le voir en simulation si l'on compare l'amplitude du signal MPL où l'on intègre l'équation 4.4 soit sur toute l'épaisseur du bulk, soit sur une zone proche de l'interface d'épaisseur équivalente à celle de la zone d'inversion de nos hétérojonctions. Le résultat de cette simulation est représenté sur la Figure 4-22 où nous avons normalisé l'amplitude MPL pour comparer les deux cas de figures. Nous voyons alors que le signal PL provenant de l'interface ne représente que 0,05 % du signal total. Par conséquent l'effet de l'interface n'est visible en MPL que lorsque sa

densité de défauts est suffisamment élevée pour influencer sur la concentration de porteurs minoritaires (ici les trous). Nous pouvons le visualiser sur la Figure 4-21b où, comme pour le déphasage MPL, la concentration de trous (p) dans le bulk ne change que pour $D_{it} > 10^{10} \text{ cm}^{-2}$.

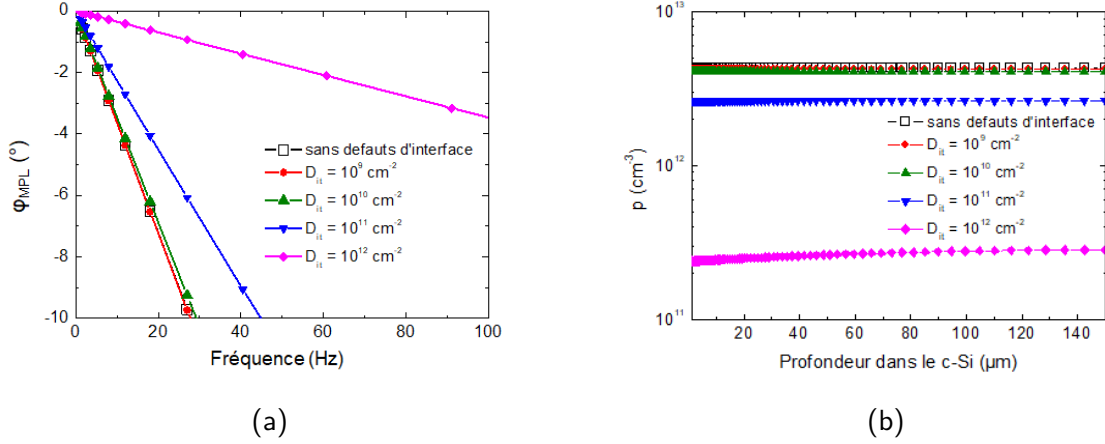


FIGURE 4-21 – Résultats de simulations (a) du déphasage MPL (φ) en fonction de la fréquence, et (b) de la concentration de trous (p) en fonction de la profondeur dans le c-Si, pour plusieurs valeurs de densités de défauts d'interface (D_{it}).

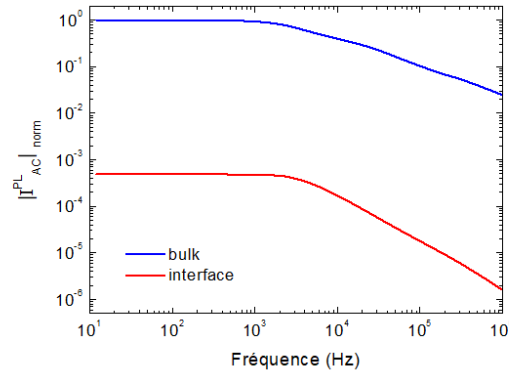


FIGURE 4-22 – Comparaison de l'amplitude MPL normalisée ($|I_{AC}^{PL}|_{norm}$) provenant de l'interface (courbe rouge) par rapport à celle du bulk (courbe bleue).

Nous allons maintenant évaluer la valeur expérimentale de D_{it} dans nos cellules. Pour cela nous simulons la durée de vie MPL en fonction de D_{it} pour une hétérojonction (p)a-Si:H/(n)c-Si avec une durée de vie du silicium cristallin de 10 ms. Nous avons choisi cette valeur car la durée de vie expérimentale du c-Si est supérieure à 3 ms d'après le constructeur et les mesures de PCD (Figure 4-18) montrent même une durée de vie d'au moins 6 ms pour l'échantillon (i) 50 nm. Nous représentons les résultats de ces simulations sur la Figure 4-23 (ligne noire). Nous avons également

superposé sur ce graphe les durées de vie MPL expérimentales de nos échantillons avant (quarts de wafers) et après clivage, ce qui nous permet de déterminer, par correspondance avec la courbe simulée, les valeurs de D_{it} de chaque échantillon. Nous les résumons dans le tableau 4.5.

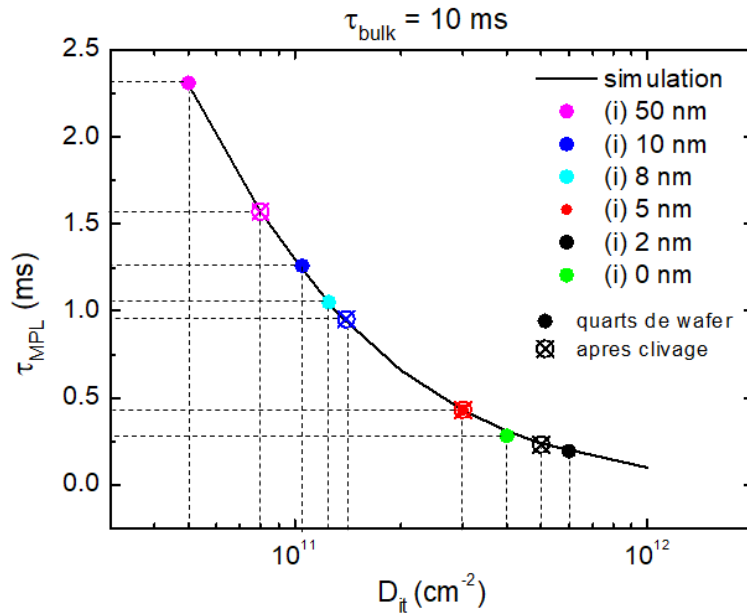


FIGURE 4-23 – Courbe de correspondance entre la durée de vie MPL (τ_{MPL}) et la densité de défauts d'interface (ligne noire: simulation, points: valeurs expérimentales).

TABLE 4.5 – Récapitulatif de l'estimation de la densité de défauts à l'interface a-Si:H/c-Si des échantillons INES 2600 à partir de la correspondance entre les durées de vie MPL expérimentales (avant et après clivage) et simulées.

Échantillon	$D_{it} (cm^{-2})$ quarts de wafers	$D_{it} (cm^{-2})$ après clivage
(i) 50 nm	5×10^{10}	8×10^{10}
(i) 10 nm	1.05×10^{11}	1.4×10^{11}
(i) 8 nm	1.25×10^{11}	-
(i) 5 nm	3×10^{11}	3×10^{11}
(i) 2 nm	6×10^{11}	5×10^{11}
(i) 0 nm	4×10^{11}	-

Comme attendu, la densité de défauts d'interface diminue avec l'augmentation de l'épaisseur de (i)a-Si:H. Dans l'hypothèse d'une durée de vie dans le bulk de 10 ms, nous estimons que D_{it} passe de 4×10^{11} à $5 \times 10^{10} cm^{-2}$ lorsque l'épaisseur de (i)a-Si:H croît de 0 à 50 nm dans le cas de quarts de wafers, et de 5×10^{11} à $8 \times 10^{10} cm^{-2}$ lorsque l'épaisseur de (i)a-Si:H croît de 2 à 50 nm dans le cas des échantillons clivés.

A présent que nous avons caractérisé nos hétérojonctions en terme de courbure des bandes à l'interface (grâce aux mesures de conductance planaire) et de densité de défauts à l'interface (grâce aux mesures de MPL), nous allons nous intéresser à la technique de PhotoCourant Modulé (MPC).

4.2.3 Mesures de PhotoCourant Modulé

4.2.3.1 Résultats de mesures

Nous commençons par réaliser quelques mesures de MPC sur nos échantillons. Un exemple typique de courbe de déphasage (φ_{MPC}) en fonction de la fréquence que nous obtenons est représenté sur la Figure 4-24.

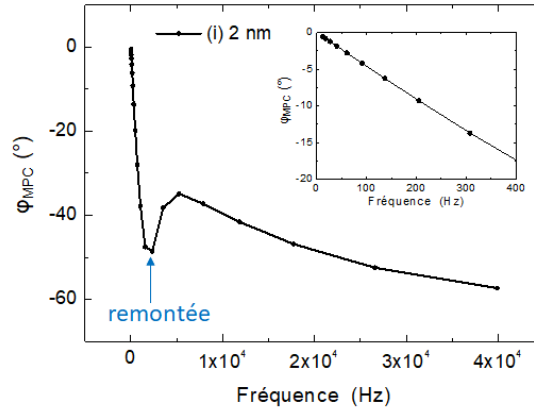


FIGURE 4-24 – Exemple de courbe de variation du déphasage MPC en fonction de la fréquence. L'encadré est focalisée sur les basses fréquences.

Nous pouvons y voir que, comme pour le cas de la MPL et de la MPC sur couche mince, le déphasage à basse fréquence varie linéairement avec celle-ci. Par conséquent, en traçant $\tan(\varphi_{MPC})$ en fonction de la pulsation ω nous devrions obtenir, à partir de la valeur de la pente, une durée de vie caractéristique de recombinaison comme dans le cas de la MPC sur couche mince [99]. Sauf que dans le cas de l'hétérojonction nous nous attendons à ce que la recombinaison en question provienne de l'interface. En effet, la présence de la zone d'inversion force *a priori* le courant à passer dans cette région. Ainsi nous nous attendons à mesurer la durée de vie des porteurs à l'interface. D'autre part, cette courbe présente une remontée du déphasage pour une fréquence d'environ 2.3 kHz. Cette remontée n'est pas présente pour chaque mesure et son apparition semble dépendre de la concentration de porteurs. En effet elle dépend du flux incident et de la température. A ce jour,

malgré plusieurs tests, nous ne sommes pas en mesure d'expliquer la provenance de cette remontée du déphasage. Pour la suite de l'étude nous nous focaliserons davantage sur le régime des basses fréquences où $\tan \varphi$ varie linéairement avec la pulsation.

Regardons à présent les résultats de mesures MPC représentés sur la Figure 4-25a pour un flux de $10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ et pour l'ensemble de nos échantillons. Nous voyons que la fréquence pour laquelle apparaît la remontée semble être identique pour tous les échantillons. Traçons à présent la tangente du déphasage à basse fréquence en fonction de la pulsation afin d'extraire la durée de vie τ_{MPC} (Figure 4-25b). Nous voyons que plus l'épaisseur de (i)a-Si:H est grande plus le déphasage aux basses fréquences est grand et par conséquent plus la valeur de τ_{MPC} augmente, comme pour la technique MPL.

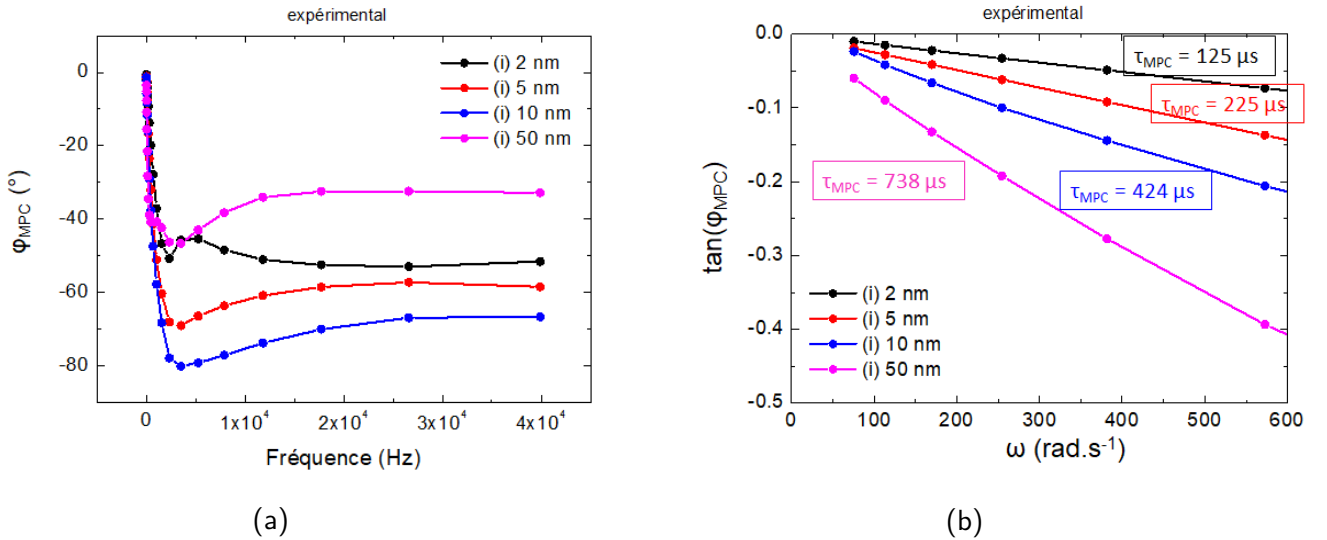


FIGURE 4-25 – Résultats des mesures MPC sur les échantillons du lot INES 2600 pour un flux incident de $10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$. (a) Déphasage MPC (φ) en fonction de la fréquence, et (b) $\tan(\varphi)$ en fonction de la pulsation (ω) et extraction de la durée de vie MPC à partir des pentes.

Ces résultats indiquent des durées de vie allant de 125 à 738 μs pour les épaisseurs de (i)a-Si:H allant de 2 à 50 nm. En comparant ces résultats avec ceux de MPL (Figure 4-26) nous voyons que les durées de vie déterminées par MPC sont plus faibles d'environ un facteur deux, ce qui montre que les grandeurs physiques mesurées sont différentes.

Nous avons vu dans le chapitre 2 que la durée de vie effective est directement proportionnelle à la concentration de porteurs minoritaires en excès par rapport à l'équilibre et inversement proportionnelle aux taux de recombinaison effectif. Dans le cas de nos hétérojonctions, le courant sous lumière reste *a priori* un courant de trous provenant de la zone d'inversion. Or dans cette région

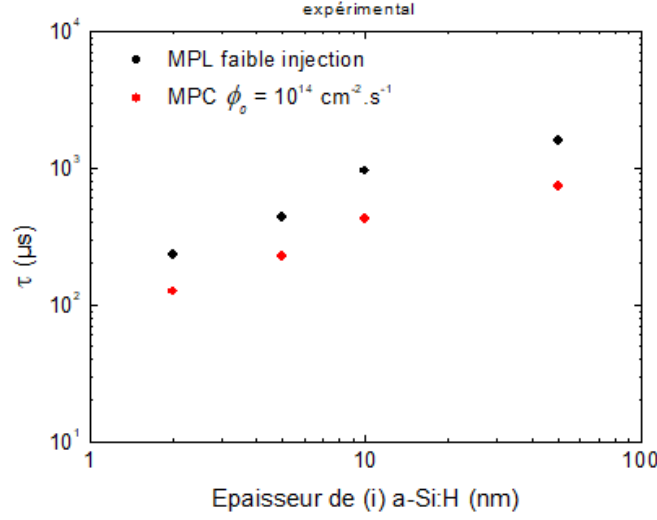


FIGURE 4-26 – Comparaison des durées de vie τ extraites par (i) MPL en régime de faible injection et (ii) MPC pour un flux de $10^{14} \text{ cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$, en fonction de l'épaisseur de (i)a-Si:H.

les trous sont les porteurs majoritaires. Il se pose donc la question de la signification du temps caractéristique mesuré en MPC.

4.2.3.2 Simulation de la technique MPC

Afin de tenter de répondre à cette question nous allons à nouveau recourir aux simulations numériques. Pour cela nous reprenons nos modèles de structures utilisés pour simuler la conductance à l'obscurité avec un espacement inter-électrodes de 2 mm. Nous ajoutons, comme en MPL, un taux de photogénération uniforme sur toute l'épaisseur de la structure. En revanche nous imposons un taux de photogénération nul sous les électrodes pour simuler la technique MPC de manière plus réaliste (Figure 4-27a). Nous avons également représenté sur la Figure 4-27b la répartition de la concentration de trous sous lumière. Nous voyons alors qu'elle s'homogénéise entre les régions sous et entre les électrodes.

Les simulations en régime alternatif avec ATLAS nous permettent de directement obtenir les parties réelle ($\Re$) et imaginaire ($\Im$) du PhotoCourant alternatif (I_{AC}^{PC}) extrait par les électrodes coplanaires. Pour calculer le déphasage nous utilisons donc la relation:

$$\varphi = -\arctan\left(\frac{\Im(I_{AC}^{PC})}{\Re(I_{AC}^{PC})}\right) \quad (4.14)$$

Nous commençons par étudier la sensibilité de la mesure MPC sur l'hétérojonction (p)a-Si:H/(n)c-

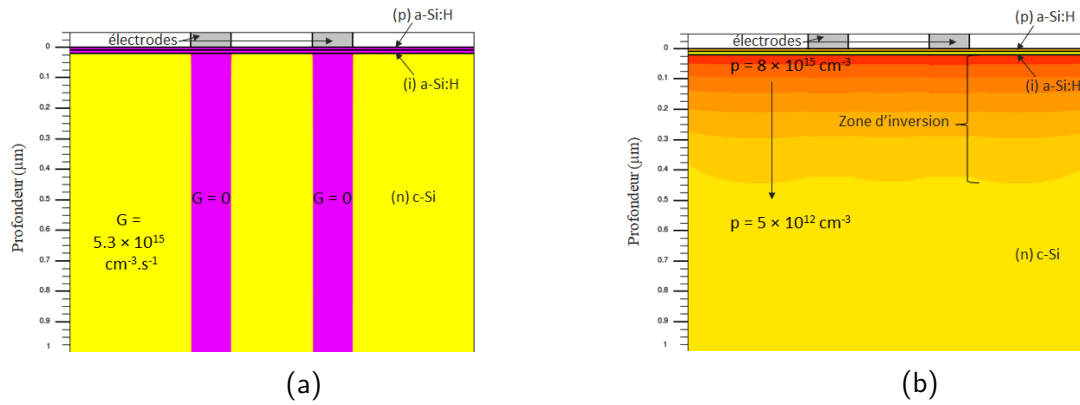


FIGURE 4-27 – Représentation 2D avec ATLAS de (a) le taux de photogénération et (b) la concentration de trous.

Si. Pour cela nous faisons varier la densité de défauts d'interface (D_{it}) comme pour les simulations de MPL. Nous traçons sur la Figure 4-28 la variation de la courbe de déphasage (φ) en fonction de la fréquence pour quelques valeurs pertinentes de D_{it} . Ces résultats nous montrent que la technique MPC n'est *a priori* pas sensible aux valeurs de $D_{it} < 10^9 \text{ cm}^{-2}$, tout comme la technique MPL. En revanche elle est effectivement sensible aux valeurs de $D_{it} > 10^9 \text{ cm}^{-2}$. En effet, nous voyons que le déphasage diminue lorsque D_{it} augmente.

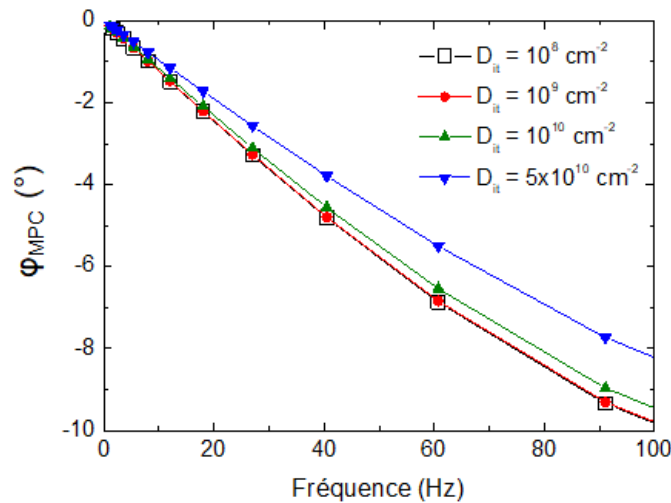


FIGURE 4-28 – Evolution du déphasage MPC, simulé pour une hétérojonction (p)a-Si:H/(n)c-Si sans (i)a-Si:H, en fonction de la fréquence et pour plusieurs valeurs de densités de défauts d'interface (D_{it}).

Nous effectuons à présent les simulations de MPC pour nos structures d'épaisseur de (i)a-Si:H variable mais sans prendre en compte, dans un premier temps, les défauts d'interface. Ces résultats sont représentés sur les Figures 4-29a et 4-29b. La variation du déphasage et des durées de

vie obtenues pour chaque échantillon va dans le même sens que nos mesures (Figure 4-25a): plus l'épaisseur de (i)a-Si:H augmente, plus τ_{MPC} augmente. Nous arrivons donc avec nos simulations à reproduire les variations expérimentales de τ_{MPC} . Cependant ces valeurs de τ_{MPC} sont plus élevées que celles déterminées par nos mesures (4-25b), ce qui montre encore une fois que la technique est bien sensible aux défauts d'interface.

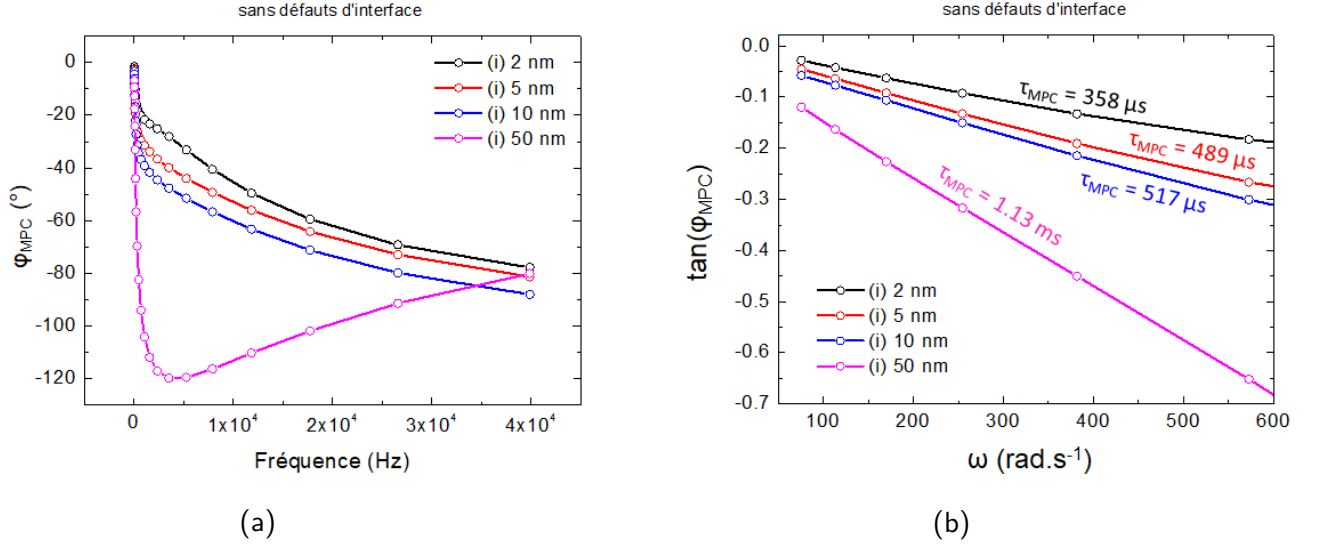


FIGURE 4-29 – Simulations MPC, sans défauts d'interface, de l'évolution (a) du déphasage (φ_{MPC}) en fonction de la fréquence et (b) de sa tangente en fonction de la pulsation, pour différents épaisseurs de (i)a-Si:H et un flux de $10^{14} \text{ cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$ (sauf pour (i) 50 nm où $\phi_0 = 10^{15} \text{ cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$ car le calcul de converge pas pour $10^{14} \text{ cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$).

Nous y ajoutons donc les valeurs de densités de défauts d'interface estimées par MPL pour une durée de vie du bulk de 10 ms. Les résultats correspondants sont représentés sur les Figures 4-30a et 4-30b. Nous voyons sur la Figure 4-30b que les durées de vie τ_{MPC} ainsi déterminées sont à présent plus faibles que les valeurs expérimentales (sauf pour (i) 50 nm où nous ne pouvons pas extraire de durée de vie car la fonction $\tan \varphi_{MPC} = f(\omega)$ ne suit pas une loi linéaire à basses fréquences). De plus, leur évolution avec l'épaisseur de (i)a-Si:H ne semble plus avoir d'ordre cohérent. Nous allons alors essayer de déterminer les valeurs de D_{it} que l'on devrait obtenir par la technique MPC. Pour cela nous faisons varier D_{it} pour chaque épaisseur de (i)a-Si:H (sauf pour (i) 50 nm pour laquelle nous rencontrons soit des problèmes de convergence des calculs, soit nous ne pouvons définir de τ_{MPC} à partir de la pente à basses fréquences de la fonction $\tan \varphi_{MPC} = f(\omega)$). Un exemple de courbe de variation de τ_{MPC} avec la densité de défauts d'interface (ici pour (i) 10 nm) est représenté sur la Figure 4-31. Nous pouvons voir que τ_{MPC} est très sensible pour les valeurs de D_{it} comprises

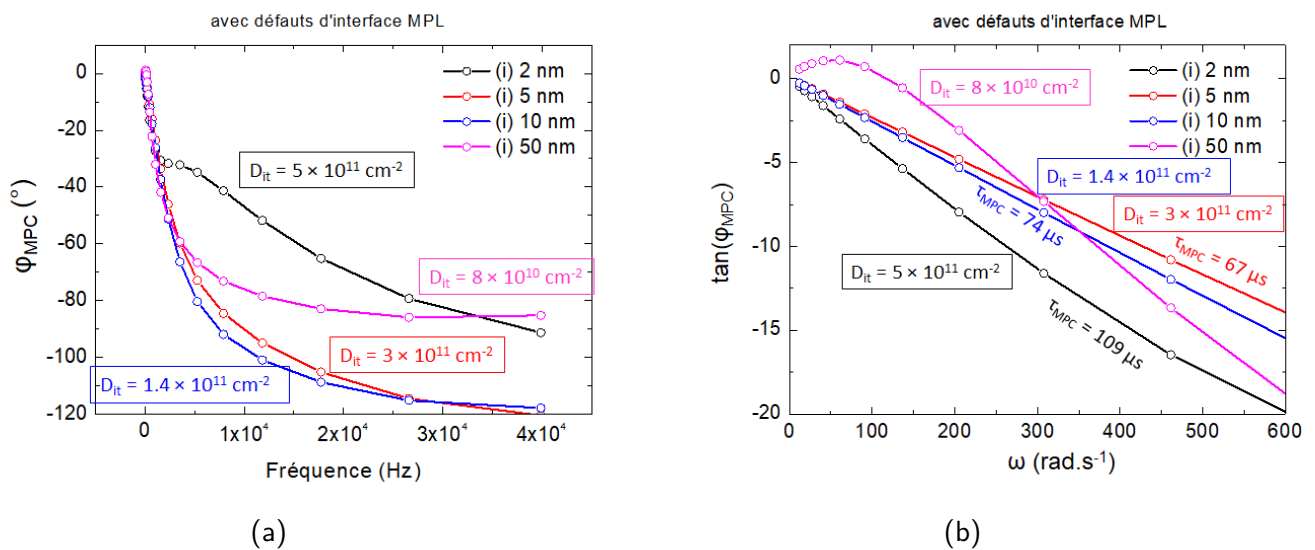


FIGURE 4-30 – Simulations MPC, avec les défauts d'interface déterminés par MPL, de l'évolution (a) du déphasage (φ_{MPC}) en fonction de la fréquence et (b) de sa tangente en fonction de la pulsation, pour différents épaisseurs de (i) a-Si:H et un flux de $10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ (sauf pour (i) 50 nm où $\phi_0 = 10^{15} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ car le calcul de convergence pas pour $10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$).

entre 10^8 et 10^{10} cm^{-2} où il chute de 780 à 168 μs .

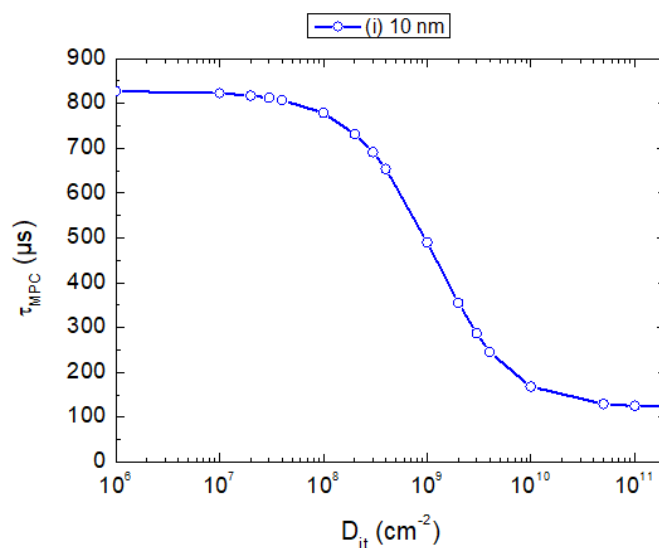


FIGURE 4-31 – Simulation de la variation du déphasage MPC (τ_{MPC}) avec la densité de défauts d'interface (D_{it}) pour (i) 10 nm.

Les valeurs de D_{it} obtenues pour chaque épaisseur de (i) a-Si:H sont données sur la Figure 4-32a où nous avons superposé les courbes expérimentales et simulées de $\tan \varphi_{MPC} = f(\omega)$. Nous voyons que pour les échantillons (i) 2 nm et (i) 5 nm les courbes à basse fréquence se superposent parfaitement pour des densités de défauts d'interface de 3×10^{11} et $8 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ respectivement. En

revanche pour l'échantillon (i) 10 nm, nous avons déterminé une pente similaire à l'expérimentale pour $D_{it} = 1.4 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ mais nous voyons que celle-ci ne se superpose pas à la courbe mesurée. Il semble donc que nous arrivons à reproduire les courbes expérimentales à basse fréquence uniquement pour les faibles valeurs d'épaisseur de (i)a-Si:H, i.e. lorsque la zone d'inversion est forte.

Si on s'intéresse maintenant aux hautes fréquences (Figure 4-32b), nous voyons que nos courbes de φ_{MPC} ne représentent pas non plus les variations expérimentales. Cela montre que notre modèle n'est pas complet. Mais dans le cadre de cette thèse, nous avons choisi de nous concentrer prioritairement sur les basses fréquences. L'étude des hautes fréquences, et notamment la signification de la remontée du déphasage sont donc une perspective intéressante de ces premiers travaux.

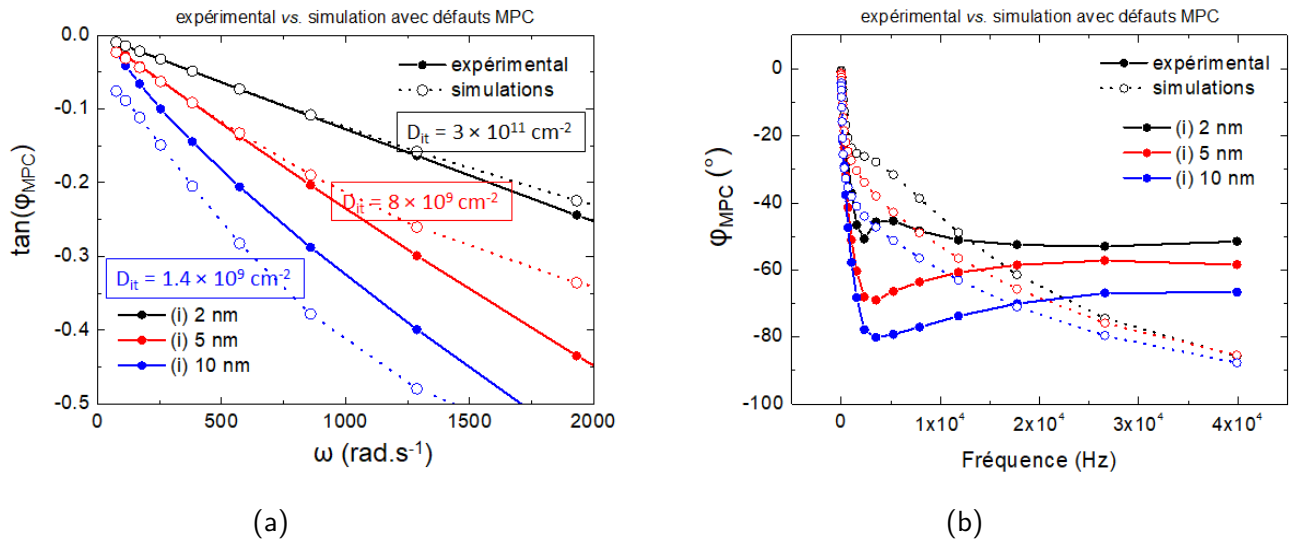


FIGURE 4-32 – Estimation par simulations MPC de la densité de défauts d'interface (D_{it}) et comparaison avec les mesures pour différents épaisseurs de (i)a-Si:H. (a) Variations de la tangente du déphasage (φ_{MPC}) en fonction de la pulsation, (b) évolution de φ_{MPC} en fonction de la fréquence.

Comparons à présent les valeurs de D_{it} obtenues à partir des temps caractéristiques à basses fréquences des techniques MPC et MPL (Table 4.6).

TABLE 4.6 – Récapitulatif de l'estimation de la densité de défauts à l'interface a-Si:H/c-Si des échantillons INES 2600 à partir de la correspondance entre les durées de vie MPL et MPC expérimentales et simulées.

Échantillon	τ_{MPL} (μs)	D_{it}^{MPL} (cm^{-2})	τ_{MPC} (μs)	D_{it}^{MPC} (cm^{-2})
(i) 50 nm	1570	8×10^{10}	738	-
(i) 10 nm	953	1.4×10^{11}	424	1.4×10^9
(i) 5 nm	431	3×10^{11}	225	8×10^9
(i) 2 nm	234	5×10^{11}	125	3×10^{11}

Nous voyons que les densités de défauts d'interface obtenues par MPC sont plus faibles que celles obtenues par MPL. Mais nous pouvons expliquer cela par les conséquences du modèle que nous avons utilisé pour simuler la courbure des bandes à l'interface. En effet, nous avons ajouté une importante densité de défauts profonds dans le gap du (i)a-Si:H afin de reproduire nos mesures de conductance planaire. Or, cette densité de défauts agit, comme les défauts d'interface, en réduisant la concentration de porteurs dans le bulk. Nous n'avons pas, dans un premier temps, pris en compte ce phénomène dans notre étude MPL car nous avons montré que cette technique était très peu sensible à l'interface. Nous avons donc modélisé une hétérojonction sans (i)a-Si:H présentant une zone d'inversion forte. Mais le fait que nous n'avons pas tenu compte de la densité importante de défauts que nous avons introduit dans les simulations de conductance, et que nous avons gardé pour les simulations MPC, pourrait expliquer les différences de D_{it} obtenues entre les deux techniques. Nous allons le vérifier en effectuant à nouveau les simulations MPL en tenant compte de la densité de défauts du (i)a-Si:H pour les différentes épaisseurs. Nous introduisons également les densités de défauts d'interface obtenus par MPC. Les résultats de ces simulations sont représentés sur la Figure 4-33a. Les durées de vie ainsi obtenues, i.e. $826 \mu s$ pour (i) 10 nm, $503 \mu s$ pour (i) 5 nm, et $256 \mu s$ pour (i) 2 nm, correspondent plutôt bien avec les valeurs expérimentales de τ_{MPL} (Table 4.6), ce qui montre une bonne cohérence entre les résultats de simulations MPC et MPL. Nous pouvons donc également en conclure une cohérence entre nos résultats de mesures par les deux techniques. Nous voyons également que la technique MPL ainsi modélisée est en réalité sensible à des valeurs de D_{it} inférieures à $10^{10} cm^{-2}$, contrairement à ce que nous avons conclu dans la partie 4.2.2.5 (Figure 4-21a). Cela peut s'expliquer par le fait qu'en introduisant la couche (i)a-Si:H dans le modèle de la MPL, nous prenons en compte la diminution de la passivation par effet de champ. En effet, nous avons vu que lorsque l'épaisseur de (i)a-Si:H augmente, la courbure des bandes dans le c-Si à l'interface diminue. Par conséquent la probabilité pour que les porteurs passent cette barrière de potentiel et viennent se recombiner à l'interface devient plus importante. La technique MPL devient alors sensible à des valeurs de D_{it} plus faibles que lorsque la couche (i)a-Si:H n'était pas considérée. Il est donc important de tenir compte dans nos simulations à la fois des défauts d'interface D_{it} et de la passivation par effet de champ dont l'impact sur la détermination de la valeur de D_{it} varie en fonction du nombre de défauts profonds (N_{DB}) introduits dans le (i)a-Si:H.

Pour comparer la nouvelle sensibilité de la technique MPL à celle de la MPC, nous avons modélisé la variation de τ_{MPL} en fonction de D_{it} pour l'échantillon avec 10 nm de (i)a-Si:H (Figure 4-33b).

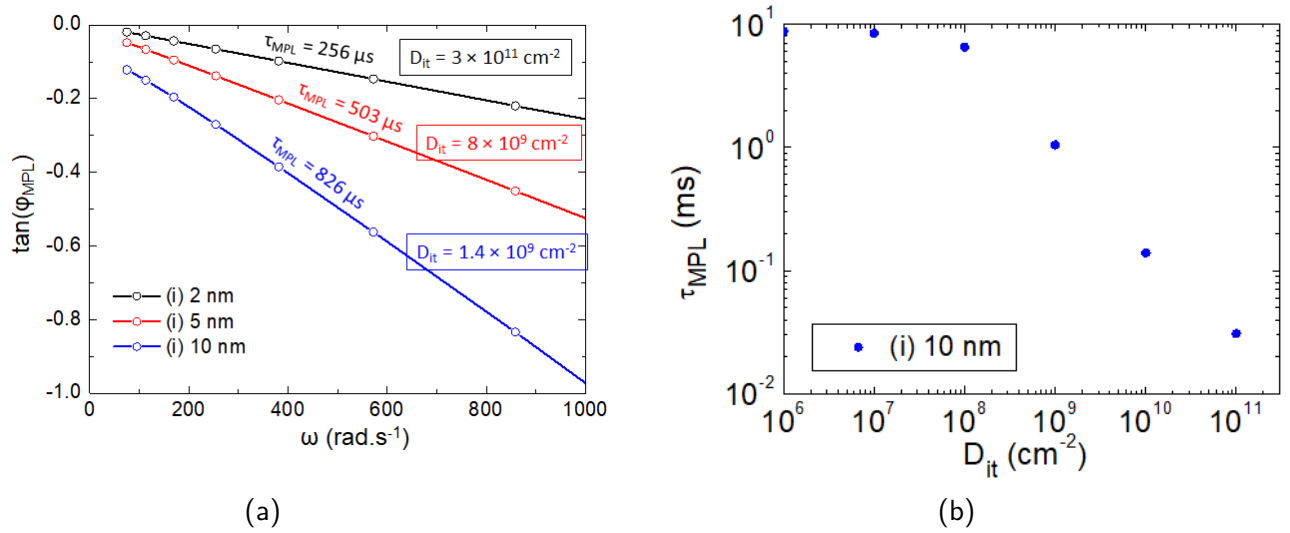


FIGURE 4-33 – (a) Détermination de la durée de vie MPL (τ_{MPL}) avec simulations des défauts profonds du (i)a-Si:H et des densités de défauts d'interface (D_{it}) déterminés par MPC. (b) Simulation de la variation de τ_{MPL} en fonction de D_{it} pour (i) 10 nm.

Nous pouvons alors voir que la sensibilité des deux techniques est similaire (voir Figure 4-31 pour τ_{MPC}): les effets des défauts d'interface sont mesurables à partir d'une concentration de défauts de 10^8 cm^{-2} . Cela correspond à une vitesse de recombinaison de surface (S) de l'ordre de 10 cm/s pour une section efficace de capture de 10^{-14} cm^2 . Nos échantillons ont donc des valeurs de S comprises entre environ 100 ((i) 10 nm) et 40000 ((i) 2 nm) cm/s.

Nous allons maintenant étudier quelques paramètres influençant le temps caractéristique MPC à basses fréquences. En premier lieu, nous nous intéressons à la durée de vie du bulk cristallin et à la mobilité des porteurs. Ces deux études se feront à l'aide de simulations. Pour finir, nous montrerons les résultats expérimentaux de la variation de τ_{MPC} avec le flux incident et la température.

4.2.3.3 Étude de la sensibilité de la mesure MPC à quelques paramètres

Étude par simulations de la sensibilité de la MPC à la durée de vie du bulk Nous reprenons une de nos structures, par exemple l'échantillon (i) 5 nm, et faisons varier la durée de vie des porteurs dans le silicium cristallin. Les études précédentes ont été effectuées avec $\tau_{bulk} = 10 \text{ ms}$. Nous comparons sur les Figures 4-34a et 4-34b les résultats de τ_{MPC} pour cette valeur durée de vie à $\tau_{bulk} \in [1 - 20] \text{ ms}$. Nous voyons sur la Figure 4-34a que le déphasage MPC ne change quasiment pas avec la variation de τ_{bulk} . En regardant de plus près ce qui se passe aux basses fréquences (Figure 4-34b) nous voyons que τ_{MPC} change peu pour $\tau_{bulk} \in [5 - 20] \text{ ms}$, et diminue légèrement pour

$\tau_{bulk} \in [1 - 5]$ ms jusqu'à une valeur de $170 \mu\text{s}$. La Figure 4-35 récapitule la variation de τ_{MPC} en fonction de τ_{bulk} . Le silicium cristallin de nos échantillons, d'après les données constructeur, a une durée de vie *a priori* supérieure à 3 ms. Par conséquent, nous pouvons conclure de ces simulations que nos mesure de τ_{MPC} ne devraient pas être impactées par la durée de vie du bulk.

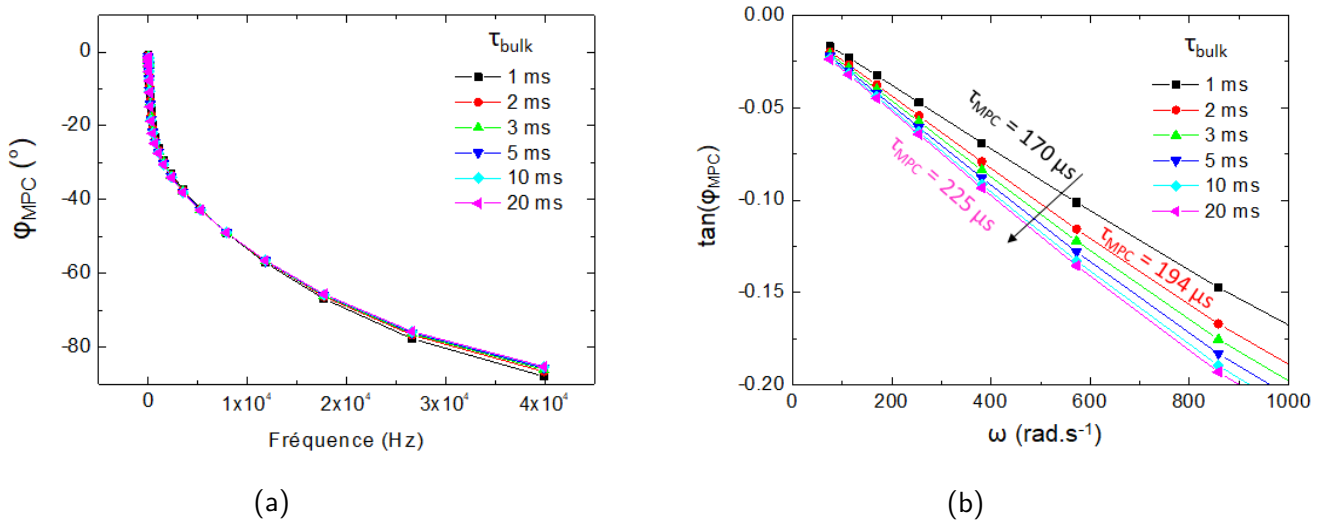


FIGURE 4-34 – (a) Simulations de la variation du déphasage MPC (τ_{MPC}) en fonction de la fréquence, et (b) variation de sa tangente en fonction de la pulsation, pour plusieurs valeurs de durées de vie des porteurs dans le bulk (τ_{bulk}) et (i) 5 nm.

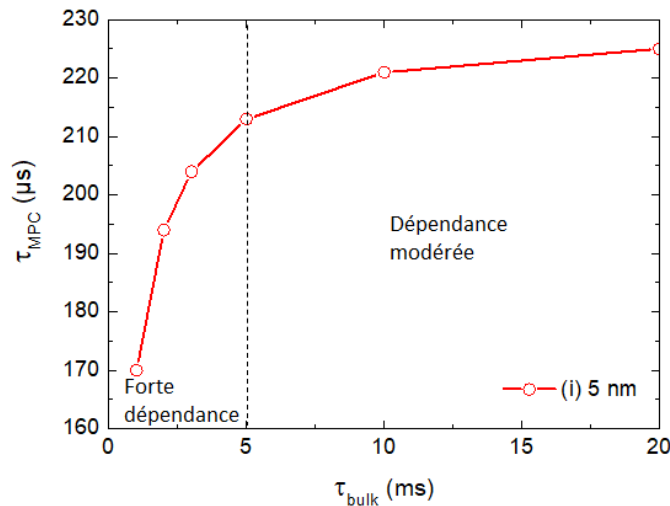


FIGURE 4-35 – Simulation de la variation de τ_{MPC} en fonction de la durée de vie du bulk cristallin τ_{bulk} pour (i) 5 nm.

Étude par simulations de la sensibilité de la MPC aux mobilités des porteurs En régime statique, le courant collecté par les électrodes coplanaires sous illumination est bien un courant de trous. En effet, d'après les simulations $I_{DC}^p \gg I_{DC}^n$. D'ailleurs, nous pouvons voir sur la Figure 4-36a représentant I_{DC} en fonction de la mobilité des électrons (μ_n , en rouge) et des trous (μ_p , en noir) dans le c-Si, que le photocourant est insensible à la mobilité des électrons. Cela montre que le courant mesuré par les électrodes coplanaires correspond bien à un courant de trous et que la technique MPC semble donc bien être sensible à la région proche de l'interface où se trouve la plus forte concentration de trous. Nous comparons ensuite ce comportement avec celui de τ_{MPC} (Figure 4-36b) et observons le même effet: τ_{MPC} ne varie pas en fonction de μ_n , mais semble varier de manière linéaire avec μ_p . Les courbes correspondantes de variation du déphasage en fonction de la fréquence sont représentées sur les Figures 4-37 et 4-38. Nous pouvons voir sur la Figure 4-37 que la mobilité des trous a une influence sur le déphasage MPC à la fois pour les hautes fréquences (Figure 4-37a) et les basses fréquences (Figure 4-37b). En revanche, la Figure 4-38 montre que ce déphasage ne varie en fonction de la mobilité des électrons que très légèrement aux hautes fréquences (Figure 4-37a) et pas du tout aux basses fréquences (Figure 4-37b).

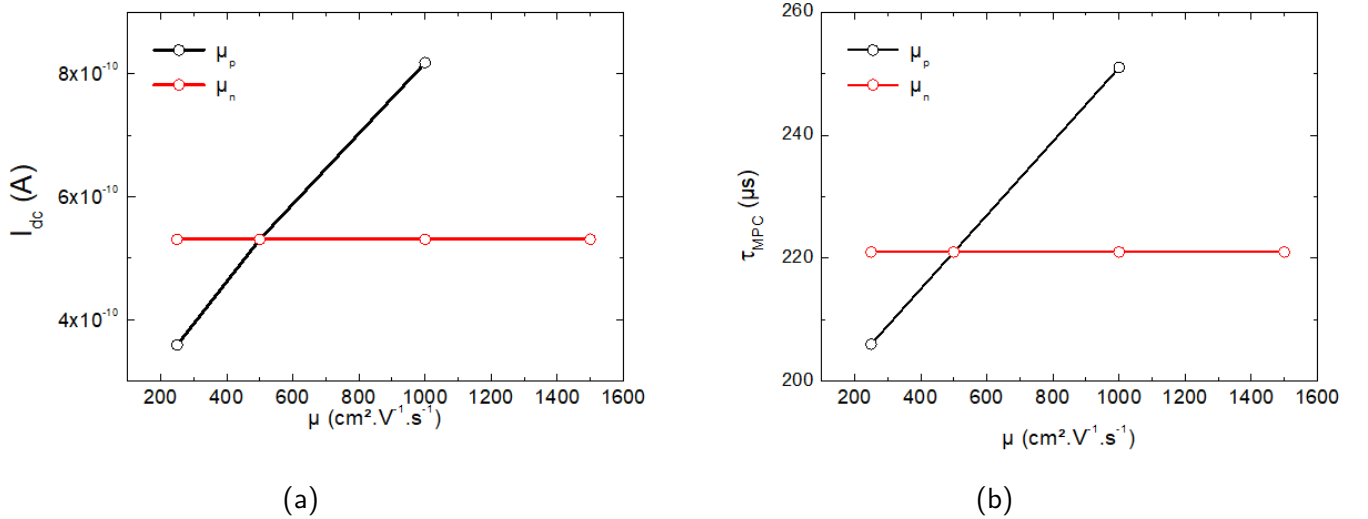
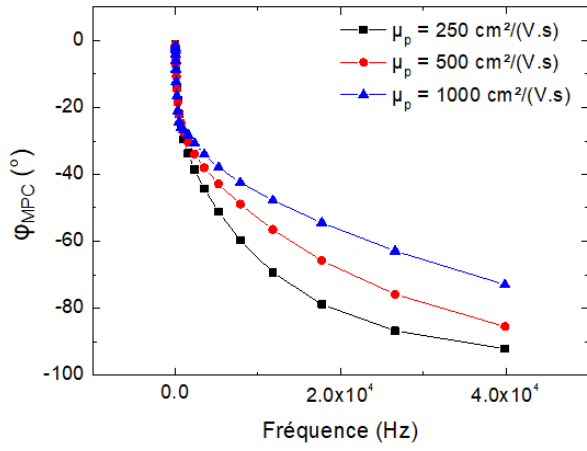
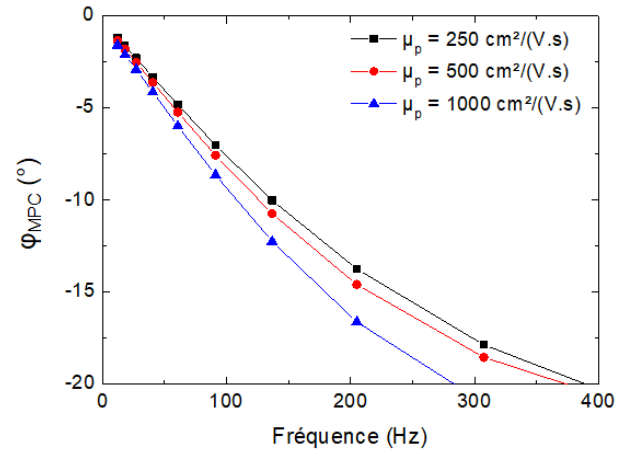


FIGURE 4-36 – Simulation de la variation de (a) I_{DC} ($V = 100\text{mV}$) et (b) τ_{MPC} en fonction de la mobilité des trous (μ_p) et des électrons (μ_n) pour (i) 5 nm.

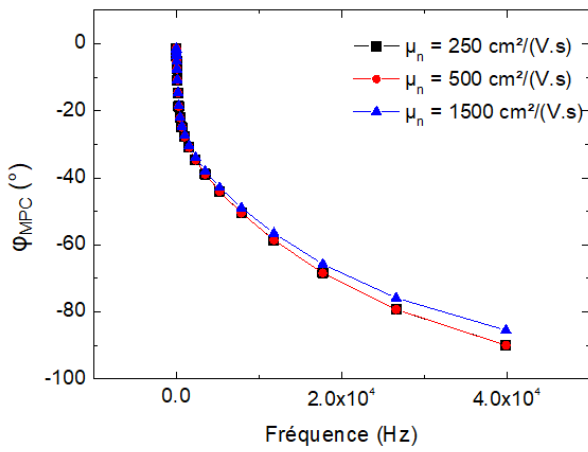


(a)

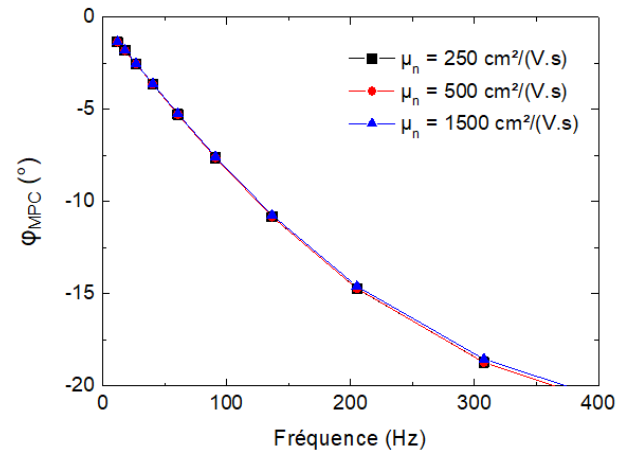


(b)

FIGURE 4-37 – Simulations de la variation du déphasage MPC (τ_{MPC}) en fonction de la fréquence pour plusieurs valeurs de mobilité des trous (μ_p). (a) Hautes fréquences et (b) basses fréquences pour (i) 5 nm.



(a)



(b)

FIGURE 4-38 – Simulations de la variation du déphasage MPC (τ_{MPC}) en fonction de la fréquence pour plusieurs valeurs de mobilité des électrons (μ_p). (a) Hautes fréquences et (b) basses fréquences pour (i) 5 nm.

Étude expérimentale de la sensibilité de la MPC au flux incident et à la température Le flux incident et la température sont les deux conditions expérimentales que nous pouvons faire varier lors des mesures du photocourant modulé. Dans cette partie nous montrons leur influence sur le temps caractéristique τ_{MPC} extrait aux basses fréquences.

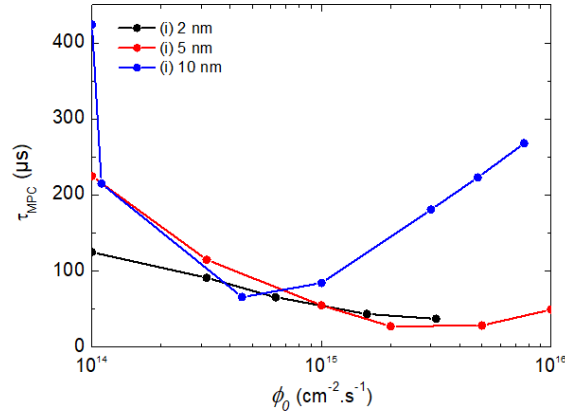
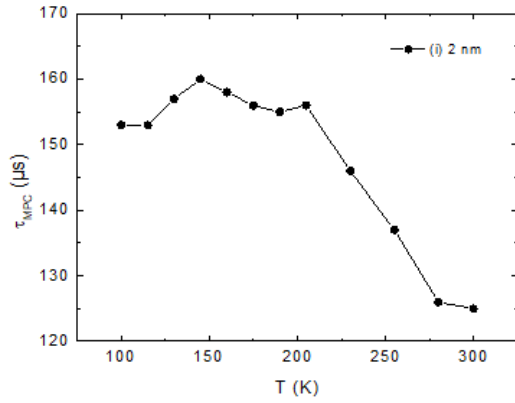


FIGURE 4-39 – Variation de τ_{MPC} en fonction du flux incident pour les échantillons (i) 2 nm à (i) 10 nm à 300 K.

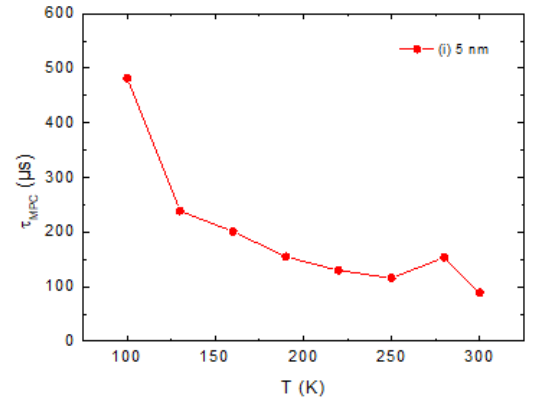
La Figure 4-39 montre l'évolution de τ_{MPC} en fonction du flux incident et donc du taux de photogénération. Nous voyons qu'indépendamment de l'échantillon, nous pouvons distinguer deux régimes: un premier à bas flux où τ_{MPC} décroît avec l'augmentation de ϕ_0 , puis un deuxième à fort flux où τ_{MPC} ré-augmente. Ce changement de régime semble avoir lieu à plus fort flux lorsque l'épaisseur de (i)a-Si:H diminue, tendance qui reste à expliquer.

Concernant les mesures en température, représentées sur les Figure 4-40a à 4-40d, nous voyons une tendance générale d'augmentation de τ_{MPC} avec la diminution de la température sauf pour l'échantillon avec 50 nm de (i)a-Si:H, i.e. celui ne présentant pas de zone d'inversion forte d'après les résultats de conductance. L'échantillon (i) 10 nm présente une sorte de zone de transition pour les températures comprises entre 130 et 280 K où la tangente du déphasage à basses fréquences ne varie pas tout à fait de manière linéaire en fonction de la pulsation. Par conséquent il est difficile d'estimer τ_{MPC} pour cette gamme de températures.

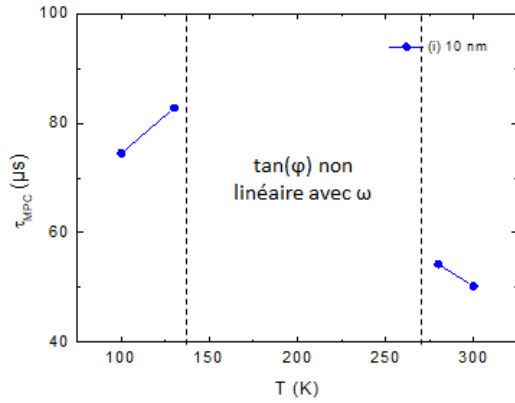
Les simulations numériques pourraient cette fois encore nous apporter des réponses, cependant elles nécessitent une amélioration de notre modèle. En effet nous rencontrons, d'une part, des problèmes de convergence des calculs pour les forts flux, et d'autre part les simulations en température doivent prendre en compte plusieurs modèles concernant les variations des mobilités et du gap de



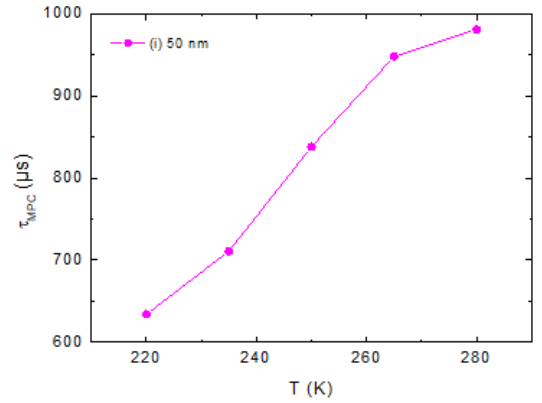
(a)



(b)



(c)



(d)

FIGURE 4-40 – Variation expérimentale de τ_{MPC} en fonction de la température ($\phi_0 = 10^{15} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$) pour différentes épaisseurs de (i) a-Si:H: (a) 2 nm, (b) 5 nm, (c) 10 nm, et (d) 50 nm.

chaque matériau en fonction de la température. Cette étude fait donc partie des perspectives de ces travaux, et les mesures présentées ici forment une base de comparaison.

4.2.4 Conclusions et perspectives

Dans cette partie de la thèse sur l'étude de l'application des techniques MPC et MPL aux cellules à hétérojonctions de silicium, nous avons tout d'abord développé un modèle semi-analytique pour simuler en 2D la technique MPL. Celui-ci nous a permis d'estimer la densité d'états de défauts de nos échantillons, pour une durée de vie du bulk de 10 ms, en faisant correspondre les résultats expérimentaux aux simulations. Puis, nous avons montré à l'aide simulations numériques que cette technique est bien sensible aux défauts d'interface. Dans notre modèle, ces défauts sont représentés à la fois

par leur densité à l'interface (D_{it}) et par les défauts profonds ($N_{DB} = 2 \times 10^{17} - 4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{eV}^{-1}$) que nous avons introduit dans le (i)a-Si:H pour faire correspondre nos simulations de conductance avec les observations expérimentales. Nous avons également estimé, par correspondance entre les mesures et les simulations MPC, les valeurs de D_{it} correspondant à chaque échantillon. Nous avons notamment montré que ces valeurs de D_{it} permettaient également de reproduire les résultats des mesures MPL, montrant ainsi une cohérence entre les résultats issus des deux types de mesures.

D'autre part, nous avons vu que les valeurs de durées de vie obtenues par les techniques MPC et MPL sont différentes. Par conséquent, elles correspondent à des grandeurs physiques différentes. La technique MPL caractérise la durée de vie différentielle effective des porteurs minoritaires du bulk cristallin, celle-ci étant affectée en présence d'une grande densité de défauts à l'interface. Nous avons donc étudié par simulations la sensibilité de la MPC à la durée de vie des porteurs dans le bulk. Nous en avons conclu que la variation de τ_{bulk} affectait peu τ_{MPC} . Nous avons également pu montrer grâce aux simulations que le courant modulé dépend de la mobilité des trous mais pas de celle des électrons. Cela indique que la MPC est *a priori* bien sensible à la zone d'inversion proche de l'interface où les porteurs majoritaires sont les trous. Pour finir, nous avons effectué une étude expérimentale de la variation de τ_{MPC} en fonction du flux et de la température. Nous avons alors pu remarquer quelques tendances mais pour les expliquer avec les simulations nous avons besoin d'améliorer notre modèle.

Nous avons vu dans le chapitre 3 que la technique MPC, appliquée à un matériau amorphe, permettait de remonter à la distribution en énergie de sa densité d'états de défauts dans le gap (DOS). Mais les relations utilisées pour cela nécessitent d'effectuer plusieurs approximations. En réalité l'expression générale du temps caractéristique MPC, déterminé par la pente de la courbe $\tan \varphi = f(\omega)$ à basses fréquences, est bien plus complexe et ne permet pas la détermination de la DOS si ces approximations ne peuvent être faites. Son expression est la suivante [91]:

$$\frac{\tan \varphi}{\omega} = \frac{\bar{n}_{dc}\mu_n\tau_n N_n((G_{dc} + \bar{p}_{dc}N_p)^2 + \bar{p}_{dc}^2 N_p^2) + \bar{p}_{dc}\mu_p\tau_p N_p((G_{dc} + \bar{n}_{dc}N_n)^2 + \bar{n}_{dc}^2 N_n^2)}{2(\bar{n}_{dc} + \bar{p}_{dc})G_{dc}(G_{dc} + \bar{n}_{dc}N_n + \bar{p}_{dc}N_p)(\mu_n\tau_n(G_{dc} + \bar{p}_{dc}N_p) + \mu_p\tau_p(G_{dc} + \bar{n}_{dc}N_n))} \quad (4.15)$$

où $\bar{n}_{dc} = c_n n$ et $\bar{p}_{dc} = c_p p$ avec n et p les concentrations d'électrons et de trous, et c_n et c_p leurs coefficients de capture respectifs. G_{dc} est le taux de photogénération continu, μ la mobilité, τ la durée de vie. $N_n = kTN(E_{tn})$ et $N_p = kTN(E_{tp})$ où $N(E_{tn})$ et $N(E_{tp})$ sont les densités d'états aux

quasi-niveaux de Fermi des porteurs piégés (électrons et trous respectivement), k est la constante de Boltzmann et T la température.

En perspective, les améliorations du modèle de simulation devraient également pouvoir nous aider à conclure si la technique MPC permet la détermination, de manière directe ou indirecte, des densités de défauts d'interface. D'autre part, seul le régime des basses fréquences a été étudié ici, mais nous avons vu que le régime à hautes fréquences présente une remontée du déphasage que nous ne savons pas expliquer à ce jour. Une deuxième perspective de ces travaux est donc de relier cette remontée à un phénomène physique.

Chapitre 5

Application de l'hétérostructure c-Si/a-Si:H dans des dispositifs à base de nanofils à jonction radiale

Ce chapitre se décompose en trois parties:

- dans la première nous présentons le contexte dans lequel a été réalisé le couplage électrique/optique pour la simulation de structures à base de nanofils à hétérojonction c-Si/a-Si:H radiale,
- dans la deuxième nous décrivons la méthode utilisée pour réaliser ce couplage,
- et dans la troisième nous illustrons ce travail en utilisant les simulations couplées pour étudier l'influence de quelques paramètres de choix de la structure nanofil sur les performances des cellules photovoltaïques basées sur cette technologie.

Ces travaux ont fait l'objet d'une communication orale dans un congrès international (EMRS Spring Meeting 2017) et de deux articles scientifiques [100, 101].

5.1 Contexte de l'étude

La réalisation du couplage des simulations électriques et optiques pour le design de cellules à base de nanofils à hétérojonction radiale a été faite dans le cadre du projet ANR SOLARIUM que nous commencerons par présenter. Puis, nous décrirons la structure que nous avons choisi de modéliser et présenterons les résultats d'une première simulation d'un nanofil afin de montrer l'importance de mettre en place le couplage avec les simulations optiques.

5.1.1 Projet SOLARIUM

Le projet ANR SOLARIUM s'inscrit dans le contexte du développement des cellules solaires de nouvelle génération. Il a pour objectif de réaliser des cellules tandem à base de nanofils de silicium à hétérojonctions radiales avec un rendement $> 15\%$. Le coeur du nanofil sera composé de silicium cristallin (c-Si) fortement dopé recouvert de couches minces de silicium amorphe (a-Si:H) et microcristallin hydrogénés (Figure 5-1). Afin de déterminer le design optimal pour ce type de structures il est nécessaire de recourir aux simulations numériques tant pour les aspects optiques qu'électriques. Ces simulations doivent également être couplées afin de déterminer les épaisseurs de couches idéales pour assurer à la fois un bon rendement optique et une collecte efficace des porteurs photogénérés. C'est ce travail de couplage que nous avons effectué dans le cadre de cette thèse. Pour cela nous avons développé une fonction permettant d'intégrer dans le simulateur ATLAS le taux de photogénération calculé par un outil spécialisé pour l'optique (RETICOLO).

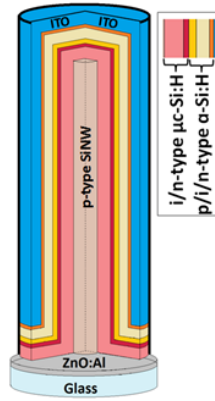


FIGURE 5-1 – Représentation schématique d'un nanofil tandem du projet SOLARIUM à base d'hétérojonctions de silicium.

5.1.2 Choix de la structure à modéliser

Dans un premier temps des essais de fabrication ont été réalisés sur les hétérojonctions suivantes: (p)c-Si/(i/n)a-Si:H et (p)c-Si/(p/i/n)a-Si:H représentée sur la Figure 5-2a.

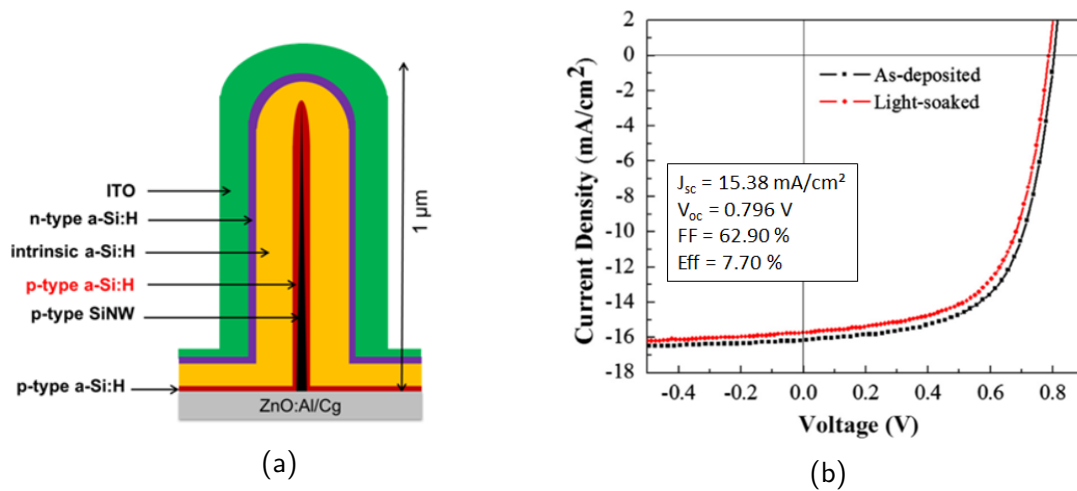


FIGURE 5-2 – (a) Représentation schématique d'un nanofil à base d'hétérojonction de silicium et (b) performances photovoltaïques obtenues [102].

Dans cette structure, contrairement à l'étude réalisée dans la première partie de cette thèse où le matériau absorbeur était le silicium cristallin, l'absorption des photons se fait dans le silicium amorphe, en majorité dans la couche intrinsèque. Cette dernière doit donc être relativement épaisse pour absorber un maximum de photons mais suffisamment fine pour garder un bon rendement de collecte des porteurs photogénérés. Dans le cas du nanofil, cela revient à avoir un compromis entre sa hauteur et son rayon.

Le coeur en silicium cristallin fortement dopé et l'oxyde conducteur transparent (ITO) permettent une collecte radiale des porteurs de charge.

L'ajout de la couche intermédiaire de (p)a-Si:H entre le (p)c-Si et le (i)a-Si:H a permis d'augmenter le V_{oc} des cellules expérimentales, par effet de passivation, qui passe de 0.8V sans (p)a-Si:H à 0.85V avec (p)a-Si:H, et même 0.9V en y incluant un gradient de dopage [102].

Ce type de cellules, ayant été caractérisées expérimentalement en terme de J_{sc} , V_{oc} , facteur de forme (FF) et efficacité (Eff) (Figure 5-2b et Annexe D pour les définitions), est donc choisi comme modèle pour nos simulations. Nous pourrions ainsi comparer les performances obtenues par le calcul issu du couplage des simulations électriques et optiques à celles mesurées.

Les épaisseurs des différentes couches constituant ce nanofil sont résumées dans le tableau suivant:

TABLE 5.1 – Epaisseurs des couches composant le nanofil.

Matériau	Epaisseur (nm)
c-Si	20
(p/i)a-Si:H	100
(n)a-Si:H	10
ITO	140

5.1.3 Simulations TCAD préliminaires

Nous commençons par réaliser quelques simulations préliminaires afin de montrer l'intérêt des nanofils d'un point de vue électrique ainsi que l'importance du couplage avec les simulations optiques. Pour cela nous réalisons la simulation des performances d'un nanofil à hétérojonction radiale seul, c'est à dire sans prendre en compte les effets d'amélioration d'absorption par les réflexions avec les autres nanofils du réseau, pour différentes épaisseurs d'absorbeur. Cette simulation est entièrement réalisée avec ATLAS en utilisant le modèle d'optique géométrique décrit dans le chapitre 3. Nous comparons les résultats obtenus avec ceux d'une cellule planaire équivalente.

La Figure 5-3 représente le schéma d'empilement des différentes couches constituant le nanofil et la cellule planaire de comparaison. Les paramètres électriques utilisés pour la simulation sont regroupés dans la Table 5.2, et les paramètres caractérisant la densité de défauts en fonction de leur répartition énergétique dans le gap pour les différents types de a-Si:H résumés dans la table 5.3. Ces

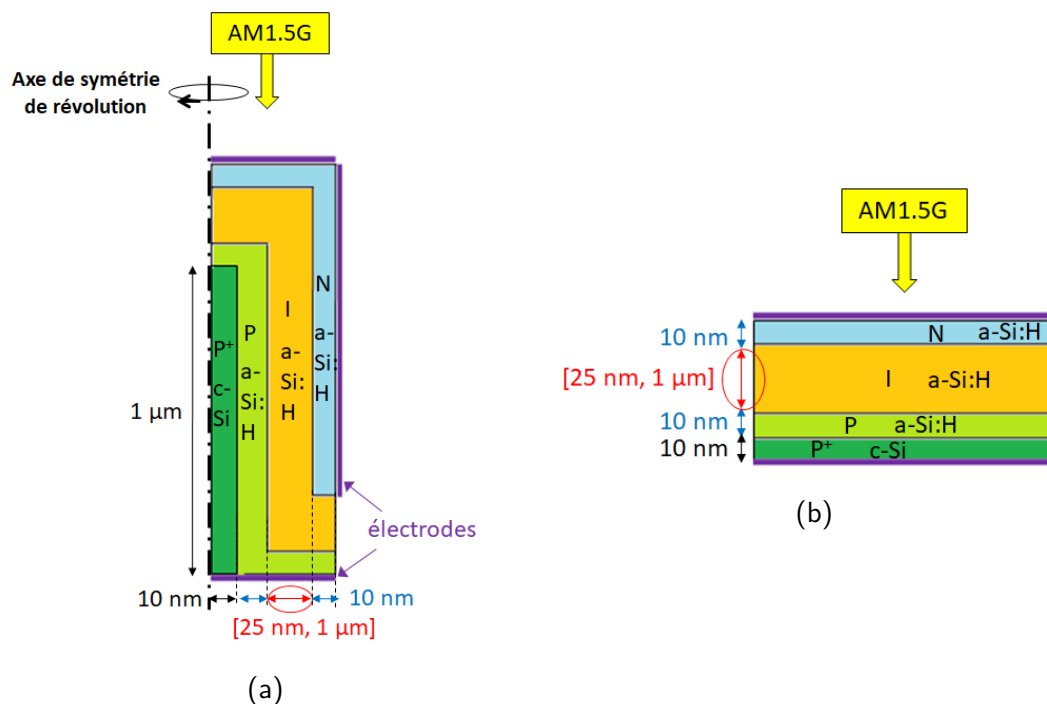


FIGURE 5-3 – Représentation schématique (a) du nanofil et (b) d’une structure planaire de comparaison simulés avec ATLAS et le modèle d’optique géométrique.

derniers ont été déterminés par paramétrisation avec DeOSt¹. Le silicium cristallin est fortement dopé ($N_d = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$) dans l’objectif de le rendre le plus conducteur possible afin d’assurer une bonne collecte radiale des porteurs de charge.

TABLE 5.2 – Paramètres des matériaux à 300K.

		(p)c-Si	(p)a-Si:H	(i)a-Si:H	(n)a-Si:H
Énergie du gap	$E_g \text{ (eV)}$	1.12	1.7	1.7	1.7
Affinité électronique	$q\chi \text{ (eV)}$	4.05	3.8	3.8	3.8
Permittivité relative	ϵ_r	11.9	11.9	11.9	11.9
Mobilité des électrons	$\mu_n \text{ (cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	1300	20	20	20
Mobilité des trous	$\mu_p \text{ (cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	491	4	4	4
Densité d’états effective dans la BC ¹	$N_c \text{ (cm}^{-3})$	2.8×10^{19}	5×10^{20}	5×10^{20}	5×10^{20}
Densité d’états effective dans la BV ²	$N_v \text{ (cm}^{-3})$	1.04×10^{19}	5×10^{20}	5×10^{20}	5×10^{20}

¹ Bande de conduction

² Bande de valence

L’aspect optique de l’ITO est modélisé comme condition aux limites du dispositif où le taux de transmission de photons est calculé à partir d’une épaisseur virtuelle d’ITO (140 nm) et de ses indices optiques n (partie réelle) et k (partie imaginaire). Ces derniers ainsi que ceux des différentes couches

1. Comme vu au chapitre 2, DeOSt est un outil qui a été développé au laboratoire pour calculer la densité d’états des défauts (DOS) dans le silicium amorphe à partir du modèle Defect-Pool et de la position du niveau de Fermi.

TABLE 5.3 – Paramètres représentant la répartition énergétique des défauts de type donneur et accepteur dans les gaps des différents types de a-Si:H. N_T et ω_T sont respectivement le préfacteur de l'exponentielle, et l'énergie caractéristique, modélisant la queue de bande. N_G et ω_G sont respectivement le maximum, et l'énergie du maximum référencée par rapport à la bande de valence, de la distribution gaussienne. Pour plus de détails voir l'Annexe A. σ_e et σ_h sont les sections efficaces de capture des électrons et de trous associées à chaque type de distribution.

		(n)a-Si:H		(i)a-Si:H		(p)a-Si:H	
		Donneur	Accepteur	Donneur	Accepteur	Donneur	Accepteur
Queues de bandes	N_T ($cm^{-3}.eV^{-1}$)	2×10^{22}	2×10^{22}	1×10^{21}	1×10^{21}	2×10^{22}	2×10^{22}
	ω_T (eV)	0.060	0.023	0.043	0.026	0.060	0.034
	$\sigma_{T,e}$ (cm^2)	1×10^{-15}	1×10^{-17}	1×10^{-16}	1×10^{-17}	1×10^{-16}	1×10^{-17}
	$\sigma_{T,h}$ (cm^2)	1×10^{-17}	1×10^{-15}	1×10^{-17}	1×10^{-16}	1×10^{-17}	1×10^{-16}
Gaussiennes	N_G ($cm^{-3}.eV^{-1}$)	2.35×10^{19}	2.35×10^{19}	3×10^{15}	3×10^{15}	1.2×10^{20}	1.2×10^{20}
	ω_G (eV)	0.19	0.19	0.19	0.19	0.19	0.19
	E_G (eV)	0.65	0.85	0.60	0.80	1.25	0.25
	$\sigma_{G,e}$ (cm^2)	1×10^{-15}	1×10^{-17}	1×10^{-16}	1×10^{-17}	1×10^{-16}	1×10^{-17}
	$\sigma_{G,h}$ (cm^2)	1×10^{-17}	1×10^{-15}	1×10^{-17}	1×10^{-16}	1×10^{-17}	1×10^{-16}
Dopage	N_a, N_d (cm^{-3})	1.7×10^{19}		-		5.9×10^{19}	
Energie d'activation	E_a (eV)	0.16 ¹		0.85 ¹		0.39 ²	

¹ $E_c - E_f$.

² $E_f - E_v$.

d'amorphe proviennent des mesures d'ellipsométrie réalisées sur les couches minces habituellement élaborées au LPCIM². La cellule est soumise à une illumination simulant le spectre solaire AM1.5G et le taux de porteurs photogénérés dans la structure est calculé avec le modèle Ray-Tracing d'ATLAS décrite dans la section 3.4. Les électrodes (ITO: Indium Tin Oxyde et AZO:Aluminium doped Zinc Oxyde) sont également modélisés comme des conditions aux limites par des travaux de sortie que nous avons choisis de manière à avoir une extraction des charges en conditions de bandes plates. Pour simplifier le modèle, les vitesses de recombinaisons aux contacts sont considérés comme infinies pour les deux types de porteurs et les recombinaisons d'interfaces sont nulles. Notons que l'objectif de ces travaux étant d'apporter un outil de couplage des simulations électriques et optiques pour le design des nanofils, l'absence de recombinaisons d'interface n'empêche pas la détermination du design idéal. De plus, compte tenu du nombre élevé d'interfaces il semble difficile de modéliser chacune d'entre elles de manière réaliste. Néanmoins, ces interfaces ont très probablement un impact plus

2. Laboratoire de Physique des Interfaces et des Couches Minces, Polytechnique, 91120 Palaiseau, France.

grand sur la valeur absolue de l'efficacité que pour une structure planaire étant donné une aire de contact plus élevée. En effet, elles se répartissent sur tout le pourtour du nanofil. D'un autre côté, le silicium amorphe intrinsèque qui sert d'absorbeur (et donc suffisamment épais) est connu pour ses bonnes propriétés de passivation, par conséquent il semble que ce type de paramètre serait difficile à améliorer dans un premier temps. De plus, étant donné la complexité de la structure, d'autres paramètres moins difficiles à maîtriser (comme l'épaisseur des couches, leur ordre d'empilement et la disposition des nanofils dans le réseau) pourraient être améliorés en priorité. Nous avons donc choisi, contrairement à l'étude précédente sur les hétérojonctions planaires où l'absorbeur était cristallin et où il a été montré dans la littérature que les recombinaisons d'interface limitaient le rendement, de ne pas étudier dans un premier temps les effets des recombinaisons d'interface dans nos travaux sur les nanofils. En revanche nous tenons toujours compte du mécanisme de recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH) dans le bulk des matériaux, ainsi que de la recombinaison Auger dans le silicium cristallin.

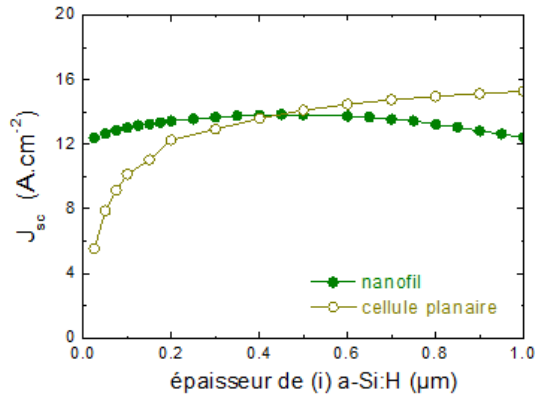
Les résultats des simulations sont représentés sur la Figure 5-4. Nous pouvons voir que malgré le fait que le V_{oc} et le facteur de forme (Figures 5-4b et 5-4c) du nanofil soient toujours inférieurs à ceux de la cellule planaire, le nanofil est plus efficace que la structure planaire pour une épaisseur de (i)a-Si:H ≤ 300 nm (Figure 5-4d) grâce à un meilleur J_{sc} pour les faibles épaisseurs de (i)a-Si:H (≤ 400 nm, Figure 5-4a). Nous voyons ainsi l'intérêt électrique des cellules à base de nanofils qui, en découplant absorption (verticale) et collecte (radiale), permettent d'augmenter les performances des structures présentant moins de matière première. En effet, nous pouvons le vérifier en comparant l'efficacité du nanofil avec celle d'une cellule planaire en terme de volume d'absorbeur (toutes les couches de a-Si:H) représentée sur la Figure 5-5a. Le volume d'absorbeur dans le nanofil est calculé comme suit:

$$V_{a-Si:H}^{nanofil} = V_{pourtour} + V_{haut} = \pi(R_{nanofil}^2 - R_{c-Si}^2)H + \pi R_{nanofil}^2 h \quad (5.1)$$

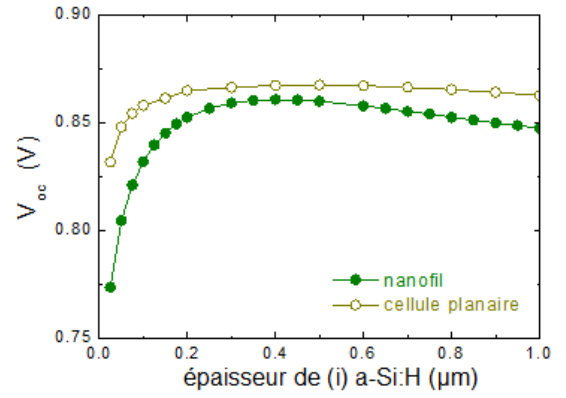
Les différentes grandeurs de cette équation sont représentées sur la Figure 5-5b.

En revanche, le calcul du volume d'absorbeur pour une structure planaire n'a pas vraiment de sens puisqu'en simulation son efficacité ne dépend que de l'épaisseur d'absorbeur. Pour effectuer tout de même la comparaison avec le nanofil, nous avons défini le volume de la cellule planaire comme le produit de l'épaisseur de a-Si:H avec une surface éclairée de $1 \mu m^2$. On peut voir d'après ces résultats que la structure nanofil a effectivement un meilleur rendement que la cellule planaire

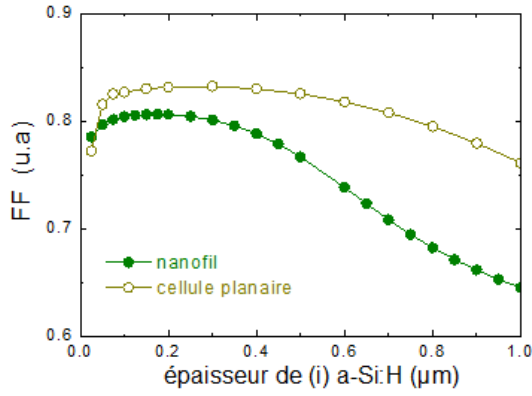
en terme de collecte pour des faibles volumes d'absorbeur ($< 0.3 \mu m^3$).



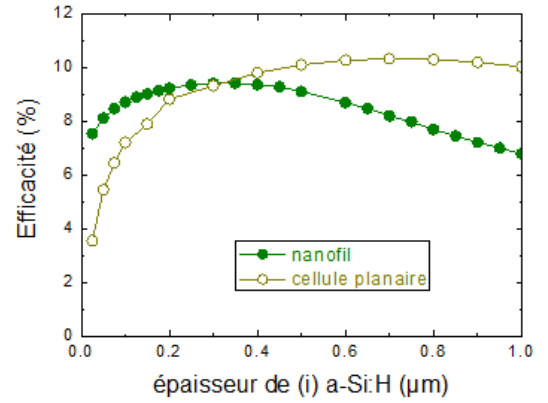
(a)



(b)



(c)



(d)

FIGURE 5-4 – Evolution des paramètres photovoltaïques (a) J_{sc} , (b) V_{oc} , (c) FF, et (d) Efficacité, d'un nanofil et de la cellule planaire de comparaison en fonction de l'épaisseur de (i)a-Si:H.

Cependant, l'intérêt du nanofil n'est pas seulement d'ordre électrique. En effet, la présence du réseau dans lequel il se trouve permet d'augmenter l'absorption [3] et donc le J_{sc} des cellules à base de nanofils. Si nous comparons la densité de courant optique J_{opt} , correspondant au J_{sc} idéal (i.e. si tous les porteurs photogénérés sont collectés), déterminée à partir de nos simulations avec le modèle d'optique géométrique et celle obtenue en tenant compte du réseau (voir section suivante) nous obtenons une J_{opt} deux fois plus faible lorsqu'on ne prend pas en compte les effets du réseau. Il est donc nécessaire de tenir compte dans les simulations des interactions optiques entre les nanofils du réseau afin d'estimer le rendement réel de la cellule. Pour simuler un tel réseau avec ATLAS il serait nécessaire de recourir aux simulations 3D et le modèle optique FDTD décrit dans le chapitre 3. Or, ce

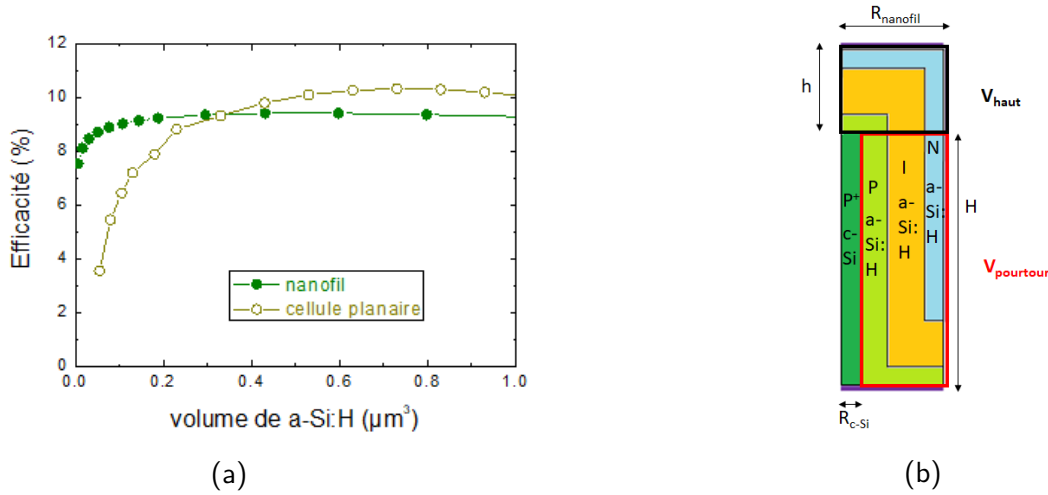


FIGURE 5-5 – (a) Evolution de l'efficacité d'un nanofil et de la cellule planaire de comparaison en fonction du volume de a-Si:H. (b) Représentation des grandeurs permettant de calculer le volume d'absorbeur dans le nanofil.

type de simulations, et compte tenu de la complexité du dispositif, nécessite non seulement une très grande expérience pour être maîtrisé, notamment au niveau du maillage pour assurer la convergence des calculs, mais est aussi très consommateur de mémoire disque et temps de calcul. Nous avons donc choisi de simplifier le problème en ré-utilisant la structure nanofil telle que modélisée dans cette partie, i.e. avec la symétrie de révolution et des coordonnées cylindriques, dans laquelle nous allons imposer un taux de photogénération calculé en 3D par un outil de simulation optique adapté basé sur la méthode RCWA (décrite dans la section qui suit) et plus pratique d'utilisation que la FDTD. Cette méthode de couplage entre simulations électriques et optiques effectuées avec deux outils différents a déjà été appliquée à des cas similaires dans la littérature [8, 9, 10, 103] et est décrite dans la section qui suit.

5.2 Réalisation du couplage électrique/optique

Ces travaux sont le résultat d'une collaboration avec Jérôme Michallon³ qui a réalisé les simulations optiques. Dans une premier temps nous décrivons de manière succincte la méthode utilisée pour extraire le taux de photogénération à partir de ces simulations. Puis nous expliquons comment est réalisé le couplage avec les simulations électriques.

3. Centre de Nanosciences et de Nanotechnologies (C2N) et Institut PhotoVoltaire d'île de France (IPVF)

5.2.1 Simulations optiques

Les simulations optiques permettent de calculer la répartition du taux de photogénération dans une structure. Dans notre cas, celle-ci a été modélisée par la méthode Rigorous Coupled Wave Analysis (RCWA) avec le programme RETICOLO développé par le laboratoire LP2N de l'Institut d'optique ParisTech [104].

La méthode RCWA est adaptée à la simulation de structures périodiques tels qu'un réseau de nanofils et a déjà été utilisé pour cette application dans la littérature [8, 103]. Les champs électriques et magnétiques étant périodiques, la méthode consiste à effectuer la décomposition en séries de Fourier des équations de Maxwell pour résoudre l'équation aux valeurs propres sous forme matricielle, puis après calcul des ondes diffractées, à revenir dans l'espace direct pour obtenir la forme des champs. La convergence de ces calculs est directement reliée au nombre d'harmoniques de la série de Fourier pris en compte. Ce nombre d'harmoniques étant le seul paramètre de convergence de cette méthode, fait de la RCWA l'outil le plus simple et plus rapide d'utilisation pour modéliser un réseau périodique. La modélisation de la cellule à base de nanofils se fait par un réseau 2D comportant des symétries en x et y (Figure 5-6), également appelé en anglais "2D crossed-grating". Les ondes électriques et magnétiques sont considérées comme des ondes planes monochromatiques. Les différentes étapes de calcul sont décrites dans [104, 103].

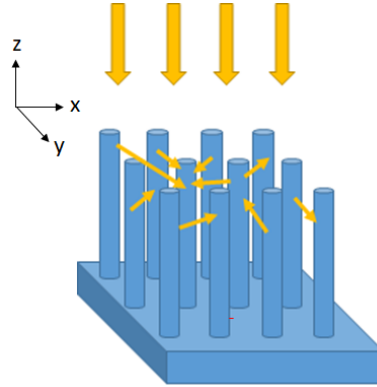


FIGURE 5-6 – Représentation 3D du réseau de nanofils.

Le taux de photogénération pour chaque longueur d'onde λ est ensuite calculé à partir du champ électrique, aux différentes coordonnées de la structure définies par un maillage, par la relation suivante:

$$G^{3D}(x, y, z, \lambda) = \frac{\Im\{\varepsilon(x, y, z, \lambda)\}}{2\hbar} (|\xi_x(x, y, z, \lambda)|^2 + |\xi_y(x, y, z, \lambda)|^2 + |\xi_z(x, y, z, \lambda)|^2) \quad (5.2)$$

où G^{3D} est le taux de photogénération calculé en 3D, $\Im\{\varepsilon\}$ est la partie imaginaire de la permittivité diélectrique, $\hbar$ est la constante de Planck réduite, et ξ_x , ξ_y et ξ_z sont les composantes du champ électrique en coordonnées cartésiennes.

5.2.2 Couplage

Une fois le taux de photogénération calculé par RCWA, on extrait le profil obtenu pour un nanofil en le projetant sur un plan 2D partant du centre du nanofil par la relation 5.3 [9] ci-dessous. On obtient ainsi une coupe 2D de la photogénération qui pourra être répétée sur 2π par une symétrie de révolution afin de reconstruire le profil 3D (Figure 5-7). Ce type de simulation intermédiaire entre la 3D et la 2D est usuellement appelée "pseudo-3D" ou "2.5D".

$$G^{2.5D}(r, z, \lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} G^{3D}(r \cos \theta, r \sin \theta, z, \lambda).d\theta \quad (5.3)$$

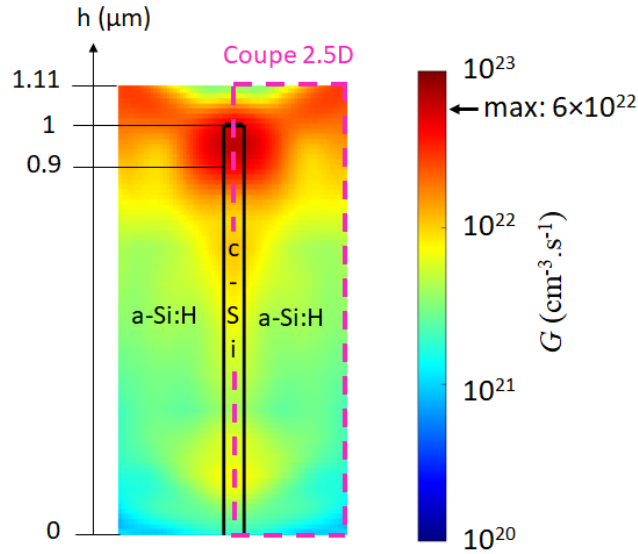


FIGURE 5-7 – Représentation 2D du taux de photogénération dans un nanofil du réseau calculé par RCWA en 3D. L'encadré en pointillés est la coupe calculée par 5.3 et utilisée pour l'implémentation dans ATLAS.

Pour estimer l'erreur introduite par cette conversion de la 3D vers la 2.5D, nous comparons les valeurs du courant optique J_{opt} qui représente le J_{sc} idéal, i.e. le courant qu'on obtiendrait si chaque paire électron/trou photogénérée était collectée. Ce courant est calculé par la relation 5.4 en pondérant l'intensité du spectre solaire AM1.5G par le facteur d'absorption $A(\lambda)$ et en intégrant le résultat sur la longueur d'onde [8]:

$$J_{opt} = \frac{q}{hc} \int_{\lambda} A(\lambda) I_{AM1.5G}(\lambda) \cdot \lambda \cdot d\lambda \quad (5.4)$$

où q , h et c sont respectivement la charge électrique élémentaire, la constante de Planck et la célérité de la lumière, avec:

$$A(\lambda) = \frac{P_{abs}(\lambda)}{P_{inc}(\lambda)} \quad (5.5)$$

où P_{inc} est la puissance incidente et P_{abs} est la puissance absorbée par la structure calculée à partir de l'intégration en volume du taux de photogénération en coordonnées cartésiennes pour la 3D:

$$P_{abs}^{3D}(\lambda) = \frac{hc}{\lambda} \iiint_{x \ y \ z} G^{3D}(x, y, z, \lambda) \cdot dx \cdot dy \cdot dz \quad (5.6)$$

ou en coordonnées cylindriques pour la 2.5D:

$$P_{abs}^{2.5D}(\lambda) = 2\pi \frac{hc}{\lambda} \iint_{r \ z} G^{2.5D}(r, z, \lambda) \cdot r \cdot dr \cdot dz \quad (5.7)$$

Nous obtenons ainsi $J_{opt}^{3D} = 14.06 \text{ mA.cm}^{-2}$ et $J_{opt}^{2.5D} = 13.92 \text{ mA.cm}^{-2}$, ce qui représente une erreur inférieure à 1% et nous permet en conséquence de négliger la variation azimutale du taux de photogénération.

Nous pouvons également calculer cette densité de courant optique à partir du taux de photogénération 2.5D intégré en longueur d'onde (équation 5.8), i.e. telle qu'elle sera calculée une fois $G^{2.5D}$ implémenté dans le simulateur électrique, et nous l'appellerons $J_{gen}^{2.5D}$.

$$J_{gen}^{2.5D} = \frac{q}{S} \iint_{r \ z} G^{2.5D}(r, z) \cdot r \cdot dr \cdot dz \quad (5.8)$$

où q est la charge électrique élémentaire et S la surface éclairée correspondant à une maille du réseau de nanofils représentée sur la Figure 5-8. Dans nos simulations cette maille est carrée et sa longueur est de 620 nm correspondant à la somme des épaisseurs des différents couches données dans la Table 5.1, comptées deux fois sauf pour le coeur de silicium cristallin, à laquelle s'ajoute l'espacement inter-nanofils de 110 nm calculée à partir de la densité optimale de nanofils déterminée expérimentalement et qui vaut $2.6 \times 10^{18} \text{ cm}^{-2}$ [102].

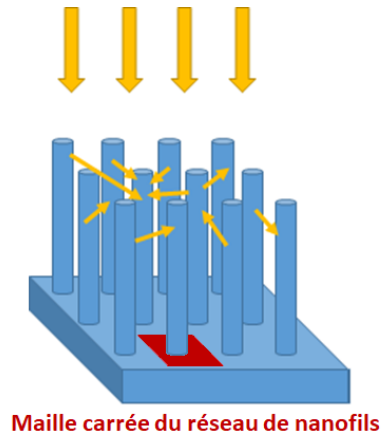


FIGURE 5-8 – Représentation schématique de la maille carrée du réseau de nanofils.

L'étape suivante du couplage consiste à introduire ce taux de photogénération dans Silvaco. Ce dernier contient bien une fonction permettant de prendre en entrée un fichier mais celle-ci ne fonctionne pas en coordonnées cylindriques. Nous avons donc réalisé, à cet effet, une fonction en langage C qui va attribuer à chaque noeud du maillage électrique de Silvaco une valeur de photogénération interpolée à partir des quatre plus proches voisins du maillage optique du fichier d'entrée.

Nous testons ensuite le bon fonctionnement du couplage en exportant le taux de photogénération pris en compte par ATLAS et en le comparant au taux de photogénération que nous lui avons mis en entrée. Il en résulte que sa répartition est bien représentative de celle simulée optiquement et en calculant $J_{gen}^{2.5D}$ par la relation 5.8 nous obtenons une valeur de 13.80 mA.cm^{-2} pour le fichier optique contre 13.79 mA.cm^{-2} pour le fichier après import soit une erreur $< 0.1\%$ permettant de valider notre méthode de couplage. Pour résumer, les différentes étapes du couplage sont regroupées sur la Figure 5-9.

Ce couplage nous permet d'étudier dans la partie suivante l'efficacité de collecte de la structure à base de nanofils en tenant compte du profil de photogénération attendu pour ce type de cellule solaire.

5.3 Résultats de simulations

Dans les publications sur les simulations de nanofils que l'on trouve dans la littérature la structure modélisée est souvent composée du nanofil proprement dit mais ne tient pas compte des couches

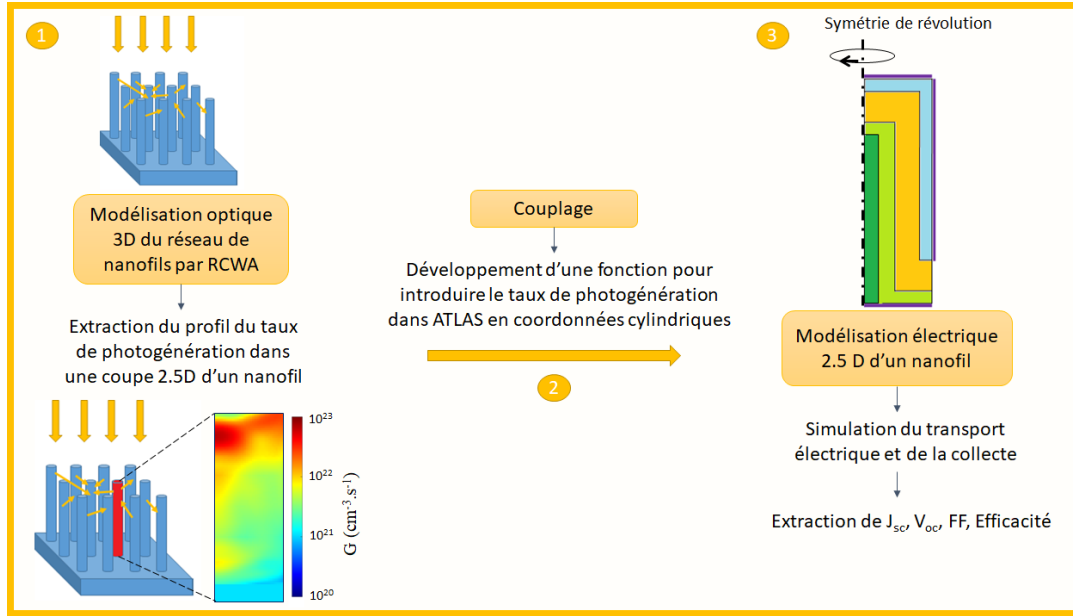


FIGURE 5-9 – Schéma synthétisant le processus de couplage de la simulation optique avec la simulation électrique

situées entre les nanofils. Or compte tenu de la technique de dépôt utilisée dans le projet, la cellule à base de nanofils est composée de deux structures: une structure radiale composée du nanofil proprement dit et d'une structure planaire de type n/i/p située entre les nanofils (Figure 5-10a). En effet, comme le montre le diagramme des bandes de la Figure 5-10b le travail de sortie du contact arrière (AZO) engendre une chute de potentiel dans le (i)a-Si:H de la partie planaire, ce qui permet d'assimiler l'espacement entre les nanofils à une cellule de type couche mince placée en parallèle de la cellule à base de nanofils proprement dits. Pour modéliser d'une manière plus réaliste nos structures à base de nanofils il est donc nécessaire de prendre en compte cette cellule planaire.

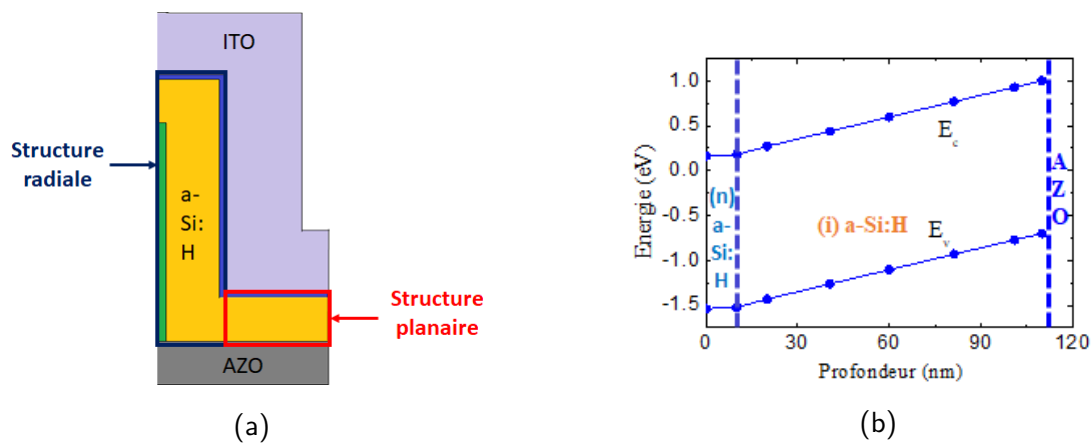


FIGURE 5-10 – (a) Représentation schématique des structures radiale et planaire de la cellule à base de nanofils. (b) Diagramme de bandes à l'équilibre de la structure planaire.

La Figure 5-11 représente la partie de la structure totale pour laquelle a été déterminée la photogénération (nanofil) dans la partie précédente. En calculant la densité de courant optique dans la partie manquante (sous et entre les nanofils) à partir de l'absorption on trouve $J_{opt}^{3D} = 1.5 \text{ mA.cm}^{-2}$, ce qui montre que son influence n'est pas négligeable en terme de photogénération.

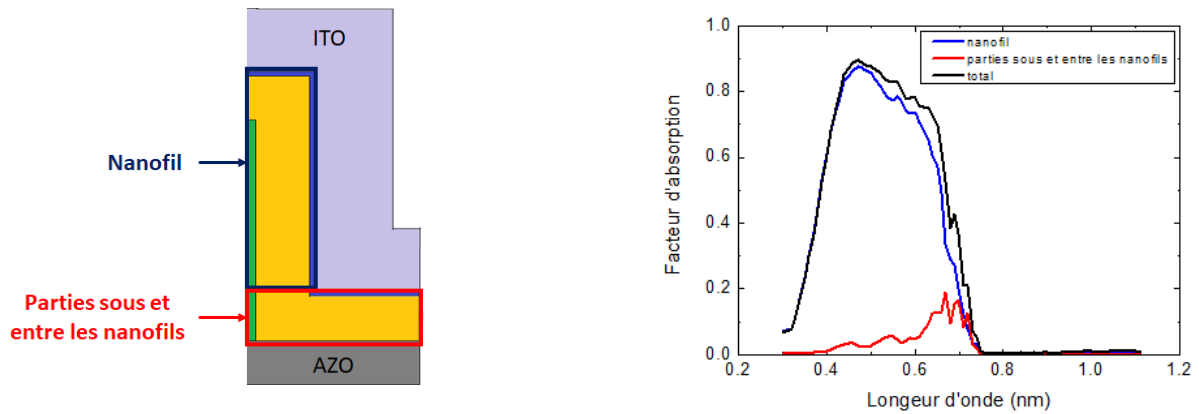


FIGURE 5-11 – Facteur d'absorption simulé par RCWA pour le nanofil proprement dit (bleu) et les parties sous et entre les nanofils (rouge).

D'autre part, maintenant que nous devons prendre en compte l'absorption dans la cellule planaire et dans la région sous les nanofils faisant partie de la cellule radiale, il faut également que nous tenions compte dans nos simulations du passage d'une maille carrée du réseau de nanofils à une maille circulaire due à la géométrie de révolution utilisée en 2.5D (Figure 5-12).

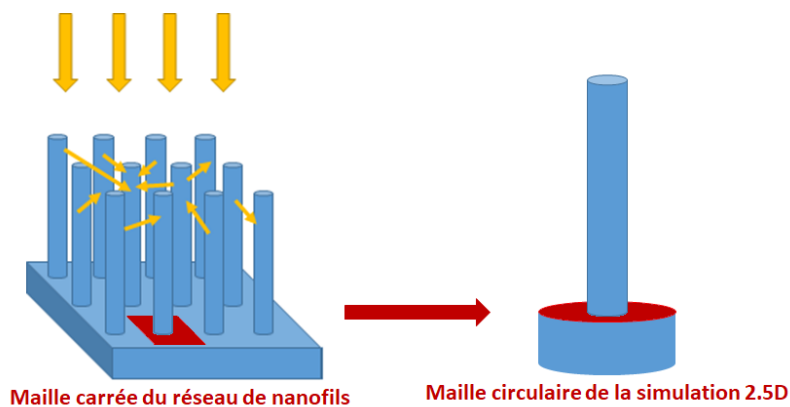


FIGURE 5-12 – Représentation schématiques de la géométrie de la maille carrée utilisée dans les simulations optiques 3D, et circulaire utilisée dans les simulations 2.5D.

Pour des raisons de problèmes de convergence dans le calcul de la répartition du taux de photogénération dans la partie manquante, et en remarquant que le facteur d'absorption des parties

entre les nanofils et sous les nanofils est faible par rapport à celui des nanofils proprement dits (Figure 5-11), nous décidons d'y répartir uniformément la taux génération calculé à partir du facteur d'absorption de la maille carrée, conservant ainsi la densité de courant optique lors du passage à la maille circulaire. Ce taux de photogénération vaut $1.085 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}.\text{s}^{-1}$. La répartition finale du taux de photogénération dans la structure complète est représentée sur la Figure 5-13.

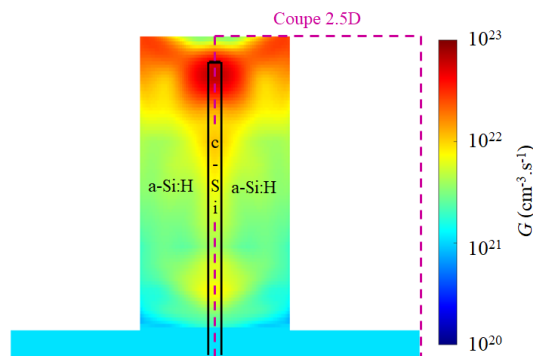


FIGURE 5-13 – Représentation 2D du taux de photogénération dans la structure complète. Dans la partie nanofil proprement dite ce taux correspond à celui de la Figure 5-7. Dans le reste de la structure (sous et entre les nanofils) il correspond à une répartition homogène du taux de photogénération et vaut $1.085 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}.\text{s}^{-1}$. L'encadré en pointillés représente la coupe 2.5D utilisée pour l'implémentation dans ATLAS pour la suite de l'étude.

En calculant $J_{gen}^{2.5D}$ pour la structure complète par la relation 5.8 nous obtenons une valeur de 15.30 mA.cm^{-2} pour le fichier optique contre 15.29 mA.cm^{-2} pour le fichier après import soit une erreur $< 0.1\%$.

Dans la partie de l'étude qui suit nous nous intéressons particulièrement à l'effet de la partie inter-nanofils sur les paramètres électriques de la cellule. Pour cela nous étudions l'évolution de l'efficacité de la cellule complète en fonction de l'influence des structures radiale et planaire qui la composent.

5.3.1 Étude de l'influence des cellules radiale et planaire sur l'efficacité de la cellule complète à base de nanofils

Afin de mettre en évidence l'influence de chacune des parties radiale et planaire sur la cellule complète nous faisons varier deux paramètres qui impactent respectivement la chute de potentiel (V_{bi}) dans le (i)a-Si:H de chacune des cellules. Les deux paramètres d'intérêt sont: le dopage du silicium cristallin (N_a) pour la structure radiale et le travail de sortie du contact arrière (W_{AZO})

pour la structure planaire. La variation de ces paramètres impacte majoritairement soit le courant de court-circuit (J_{sc}), soit la tension de circuit-ouvert (V_{oc}). Le facteur de forme étant moins impacté, ces deux paramètres (N_a et W_{AZO}) influencent donc directement l'efficacité de la cellule complète.

La Figure 5-14a représente l'évolution du J_{sc} en fonction de N_a pour plusieurs valeurs de W_{AZO} . On remarque qu'il dépend fortement du dopage du c-Si mais très peu de W_{AZO} . A contrario, la Figure 5-14b représente le V_{oc} en fonction de W_{AZO} pour plusieurs valeurs du dopage du c-Si, et montre une plus forte dépendance du V_{oc} avec W_{AZO} qu'avec N_a qui apparaît seulement pour des valeurs élevées de W_{AZO} ($5.1 \text{ eV} < W_{AZO} < 5.5 \text{ eV}$).

Ces tendances peuvent s'expliquer à l'aide des diagrammes de bandes à l'équilibre des deux types de cellules (Figure 5-15): d'une part, la chute de potentiel (V_{bi}) dans le (i)a-Si:H de la cellule radiale augmente avec le dopage du c-Si (Figure 5-15b), ce qui renforce le champ électrique radial et par conséquent améliore la collecte des porteurs de charge, d'où l'augmentation du J_{sc} . Le même effet a lieu dans la cellule planaire mais comme la majorité des porteurs est photogénérée dans la cellule radiale, l'amélioration de la collecte par effet de champ y est moindre. Cela explique la faible dépendance du J_{sc} avec W_{AZO} (Figure 5-14a).

D'autre part, afin de comprendre la forte dépendance du V_{oc} avec W_{AZO} nous comparons les diagrammes de bandes à l'équilibre des deux types de structure pour deux valeurs de W_{AZO} : 4.8 eV et 5.2 eV (Figures 5-15c et 5-15d). On y observe que pour la faible valeur de W_{AZO} le V_{bi} est plus faible dans le (i)a-Si:H de la cellule planaire, contrairement au cas d'une valeur plus élevée de W_{AZO} où le V_{bi} le plus faible correspond à la cellule radiale.

Notons maintenant que le V_{oc} peut s'approximer comme suit d'après le modèle à une diode :

$$V_{oc} = \frac{nkT}{q} \ln\left(\frac{J_{sc}}{J_{obs}}\right) \quad (5.9)$$

où n est le facteur d'idéalité de la diode, k est la constante de Boltzmann, T est la température, q est la charge électrique élémentaire, et J_{obs} est la densité de courant d'obscurité. Or comme le montre la Figure 5-14a, la dépendance du J_{sc} avec W_{AZO} est négligeable. Par conséquent, les autres paramètres étant constants, la variation du V_{oc} avec W_{AZO} s'explique par celle du courant d'obscurité J_{obs} . Or le courant passe en majorité par le chemin le moins résistif, c'est à dire là où la barrière de potentiel à franchir (ici V_{bi}) est la plus faible. Nous voyons donc sur la Figure 5-14b que le V_{oc} est dégradé et ne dépend que de W_{AZO} lorsque la cellule planaire est plus conductrice que la radiale (i.e. $W_{AZO} < 5.1 \text{ eV}$). Par contre, lorsque $W_{AZO} > 5.1 \text{ eV}$, la cellule radiale devient plus conductrice

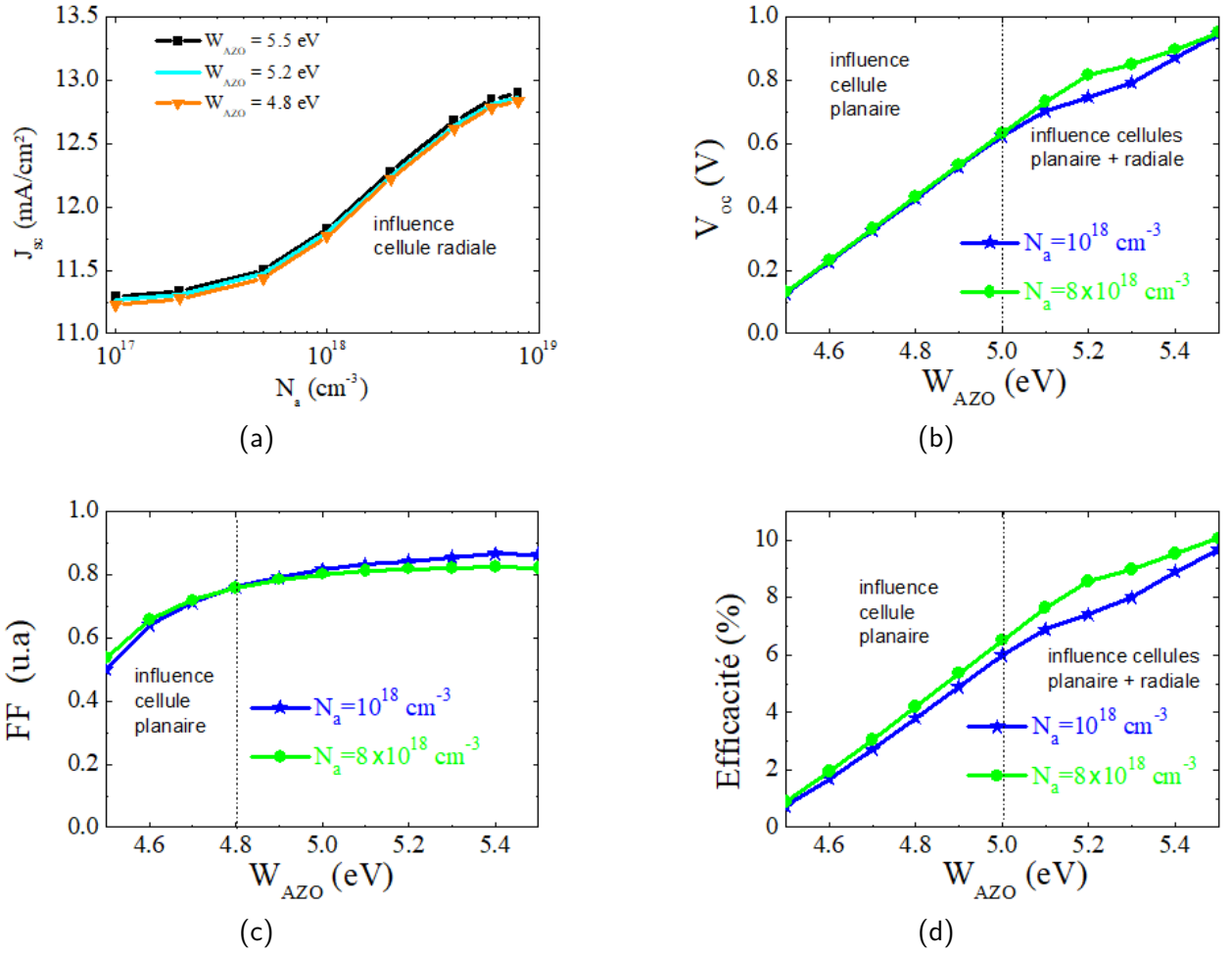


FIGURE 5-14 – Paramètres photovoltaïques de la cellule complète à base de nanofils (partie radiale + partie planaire). (a) Variation du J_{sc} avec le dopage du silicium cristallin (N_a) pour trois valeurs de travail de sortie de l'AZO (W_{AZO}) (carrés noirs: 5.5 eV ; ligne cyan: 5.2 eV et triangles oranges: 4.8 eV). (b), (c) et (d) Variations du V_{oc} , du facteur de forme et de l'efficacité avec W_{AZO} pour deux valeurs de N_a (étoiles bleues: $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et cercles verts: $8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$).

que la planaire et le V_{oc} commence à dépendre du dopage du c-Si.

De plus, lorsqu'on trace J_{obs} en fonction de la tension (Figure 5-16a) on observe bien son augmentation avec la baisse du travail de sortie du contact arrière. Et en visualisant la répartition du courant d'obscurité à une tension donnée (ici nous avons choisi $V = V_{oc}$ de la structure avec $W_{AZO} = 5 \text{ eV}$) pour plusieurs valeurs de W_{AZO} (Figures 5-16c à 5-16d) on observe bien la présence d'un courant important dans la cellule planaire pour une faible valeur de W_{AZO} . Nous pouvons donc confirmer que la chute du V_{oc} est due à une augmentation du courant d'obscurité dans la cellule planaire.

Le facteur de forme, représenté sur la Figure 5-14c, varie peu en fonction du dopage du c-Si et

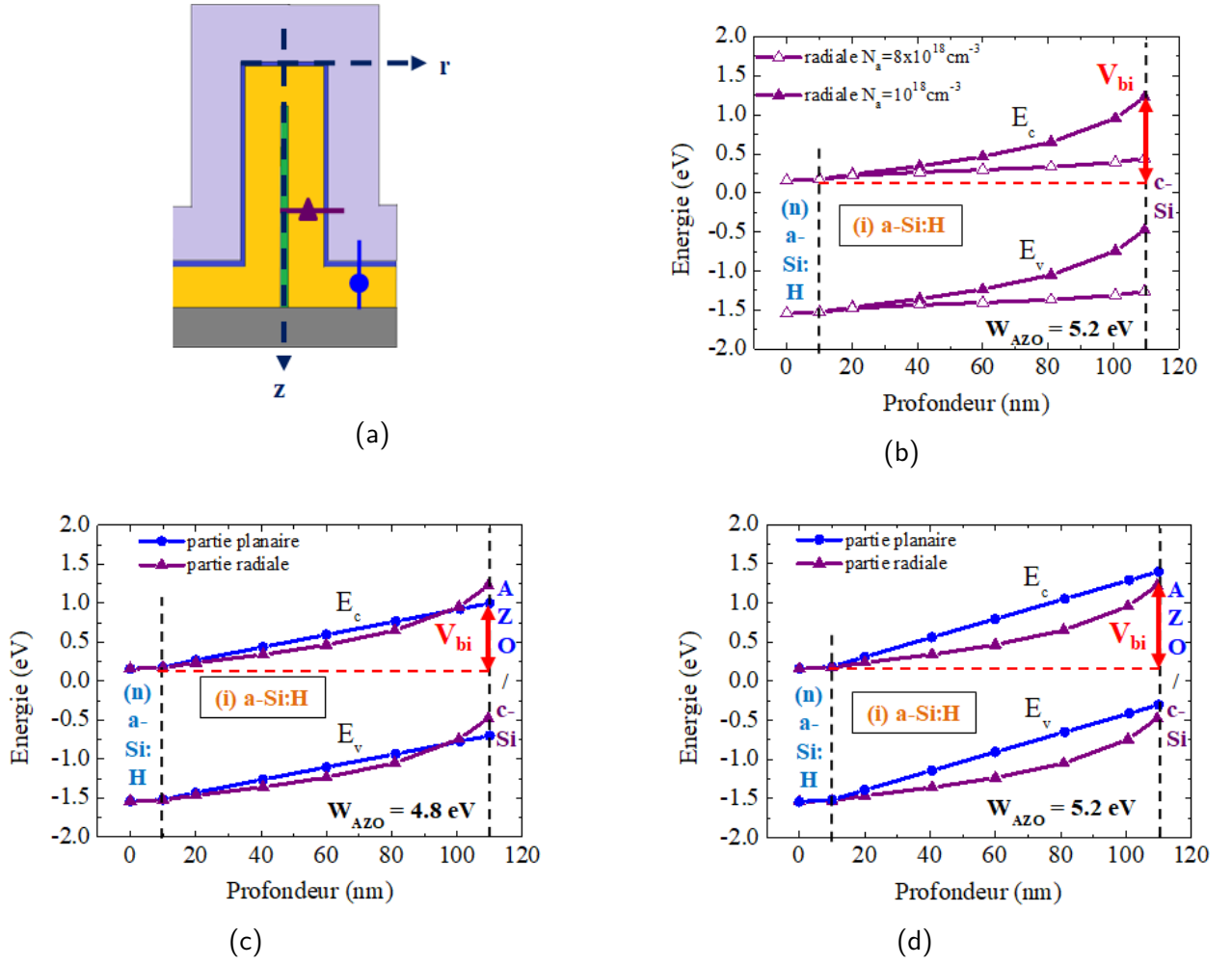


FIGURE 5-15 – Diagrammes de bandes (DDB) de la structure à l'équilibre. (a) Schéma situant les coupes radiale ((n)a-Si:H/(i)a-Si:H/(p)c-Si: triangles violets) et planaire ((n)a-Si:H/(i)a-Si:H/AZO): ronds bleus). (b) DDB de la coupe radiale pour deux valeurs de N_a (triangles pleins: $8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et triangles creux: $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$). (c) et (d) comparaison des DDB dans les parties radiale et planaire pour respectivement $W_{AZO} = 4.8 \text{ eV}$ et $W_{AZO} = 5.2 \text{ eV}$ avec $N_a = 8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

de W_{AZO} pour des valeurs supérieures à 4.8 eV. En revanche il commence à chuter pour des valeurs inférieures à 4.8 eV mais de moindre façon que le V_{oc} .

Maintenant, lorsque l'on s'intéresse à l'efficacité de la cellule complète (Figure 5-14d) on observe qu'elle suit la tendance du V_{oc} en fonction de W_{AZO} en passant de 1% à 10% pour W_{AZO} variant de 4.5 eV à 5.5 eV. L'efficacité de notre cellule à base de nanofils est donc très influencée par le travail de sortie du contact arrière de la cellule planaire alors que l'influence de la cellule radiale apparaît surtout lorsque $W_{AZO} > 5 \text{ eV}$, i.e. lorsque cette cellule planaire devient suffisamment résistive pour que le courant d'obscurité passe majoritairement dans la cellule radiale.

Dans cette partie de l'étude nous avons donc montré que de mauvaises conditions de contact

arrière, ou à plus faible impact le trop faible dopage du c-Si, pouvait dégrader l'efficacité de toute la cellule. Il est donc nécessaire et important de prendre en compte dans les simulations les propriétés électriques et optiques de l'espacement entre les nanofils. Dans la partie qui suit nous allons montrer que cette dégradation de l'efficacité peut être limitée grâce à une couche tampon qui viendra écranter le champ électrique des cellules radiale et planaire.

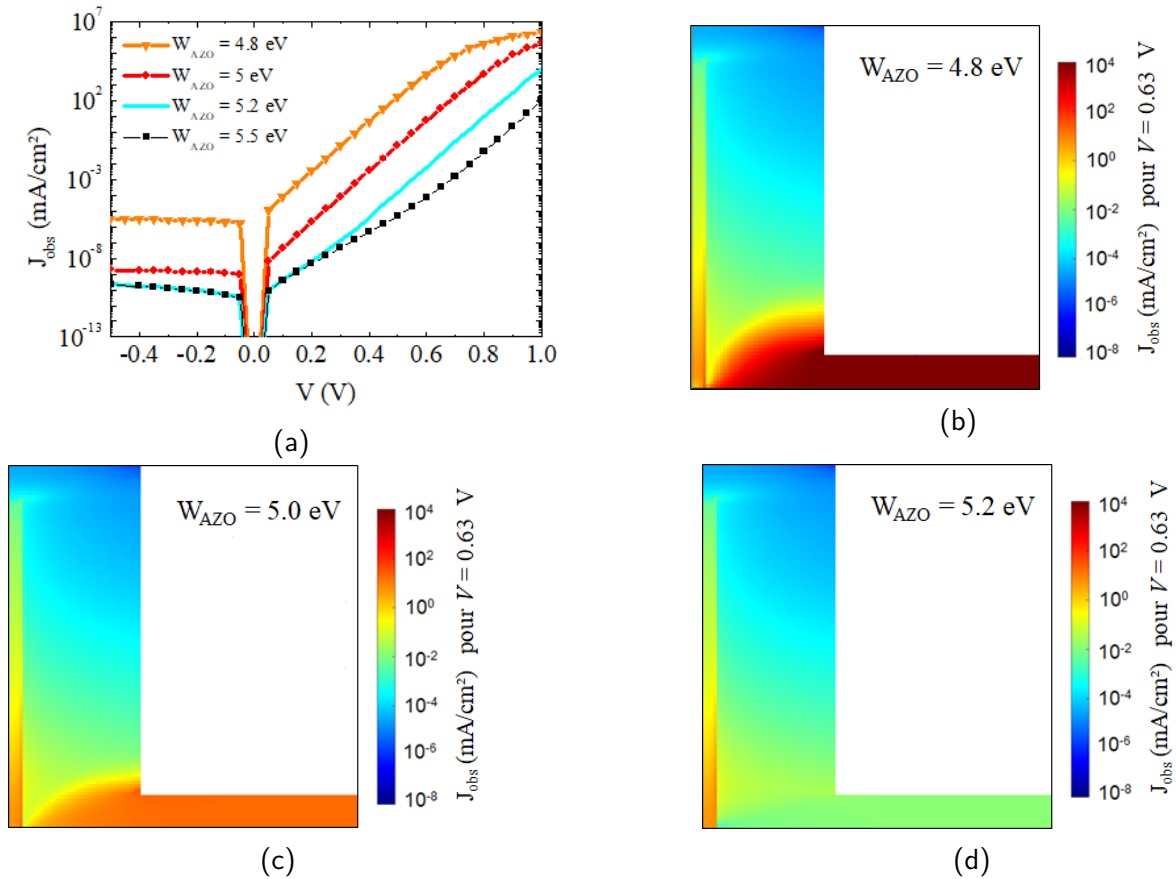


FIGURE 5-16 – (a) Variation de la densité de courant d'obscurité (J_{obs}) en fonction de la tension pour quatre valeurs de W_{AZO} (triangles oranges: 4.8 eV ; ronds rouges: 5 eV ; ligne cyan: 5.2 eV et carrés noirs: 5.5 eV). Cartographies de la distribution de J_{obs} pour une tension donnée et (b) $W_{AZO} = 4.8$ eV, (c) $W_{AZO} = 5$ eV et (d) $W_{AZO} = 5.2$ eV.

5.3.2 Une couche tampon pour limiter la dégradation de l'efficacité de la cellule

Dans la cellule expérimentale, des essais ont été réalisés dans l'objectif de passiver l'interface c-Si/(i)a-Si:H en introduisant une fine couche de silicium amorphe hydrogéné dopé P, (p)a-Si:H [102]. Nous rajoutons donc cette couche supplémentaire à notre simulation, toujours en gardant des interfaces idéales (i.e. sans recombinaisons d'interface), afin de montrer que mis à part le fait que cette couche puisse réduire le nombre de liaisons pendantes à l'interface, elle agit également en tant que passivation par effet de champ.

La Figure 5-17 représente la nouvelle cellule simulée avec 10 nm de (p)a-Si:H à l'interface c-Si/(i)a-Si:H et qui s'étend donc à l'interface AZO/(i)a-Si:H lors du dépôt par PECVD. Afin de garder un taux de photogénération constant pour comparer les cellules avec et sans (p)a-Si:H, nous nous basons sur le fait que les indices optiques du silicium amorphe dopé sont très proches de ceux de l'amorphe intrinsèque. Par conséquent nous réduisons l'épaisseur de (i)a-Si:H à 90 nm pour ajouter les 10 nm de (p)a-Si:H.

L'effet de cette nouvelle couche sur le J_{sc} et le V_{oc} de la cellule solaire est représenté sur les Figures 5-18a et 5-18b respectivement où ils sont comparés avec les performances sans (p)a-Si:H. On y observe que le J_{sc} ne dépend quasiment plus du dopage du c-Si et que la chute du V_{oc} lors de la diminution de W_{AZO} est fortement atténuée. De plus le V_{oc} est nettement moins sensible au dopage du c-Si pour les larges valeurs de W_{AZO} .

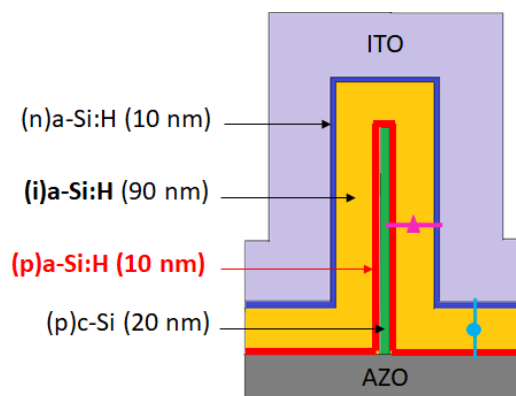


FIGURE 5-17 – Schéma du nanofil avec la couche (p)a-Si:H.

Ces résultats s'expliquent de nouveau à l'aide des diagrammes de bandes à l'équilibre dans les structure planaires et radiales représentées en Figures 5-19 et 5-20. Sur la Figure 5-19 nous avons

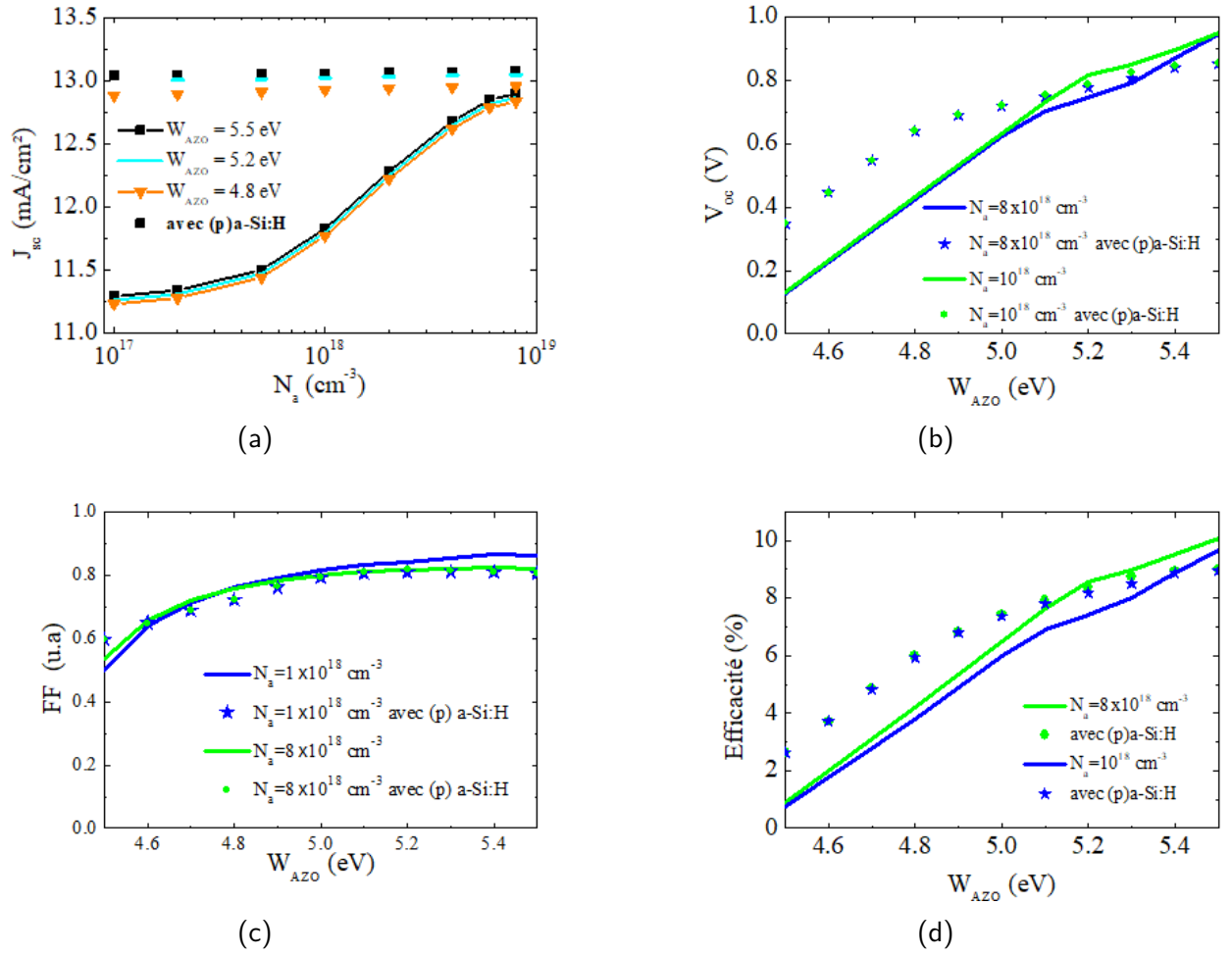


FIGURE 5-18 – Paramètres photovoltaïques de la cellule complète à base de nanofils avec (symboles) et sans (p)a-Si:H (lignes). (a) Variation du J_{sc} avec le dopage du silicium cristallin (N_a) pour trois valeurs de travail de sortie de l'AZO (W_{AZO}) (carrés noirs: 5.5 eV ; ligne cyan: 5.2 eV et triangles oranges: 4.8 eV). (b) et (c) et (d) Variations du V_{oc} , du facteur de forme et de l'efficacité avec W_{AZO} pour deux valeurs de N_a (étoiles bleues: $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et cercles verts: $8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$).

représenté à nouveau le J_{sc} et les diagrammes de bandes de la cellule radiale sensibles au dopage du c-Si. On y observe que le V_{bi} dans le (i)a-Si:H est déterminé par la couche p: le V_{bi} devient insensible aux variations du dopage du c-Si (Figure 5-19b).

L'important écart de J_{sc} pour les faibles dopages entre les cellules avec et sans (p)a-Si:H s'explique par une forte augmentation du V_{bi} et donc du champ électrique en présence de la couche p (Figure 5-19c). Cet écart est nettement moindre à fort dopage (Figure 5-19d) mais explique également le fait que le J_{sc} soit toujours plus élevé avec cette couche p. En effet, il augmente de 12.8 mA.cm^{-2} à 13.1 mA.cm^{-2} pour les dopages considérés (Figure 5-19a), contrairement aux valeurs sans (p)a-Si:H ($11.2 - 12.9 \text{ mA.cm}^{-2}$).

Concernant le V_{oc} , représenté à nouveau sur la Figure 5-20a, il apparaît que la présence de la couche p est bénéfique pour les faibles valeurs de W_{AZO} . Cela se traduit également sur les diagrammes de bandes à l'équilibre de la cellule planaire représentés sur la Figure 5-20d, où nous pouvons observer que le travail de sortie de l'AZO a moins d'influence sur le V_{bi} de la partie planaire en présence du (p)a-Si:H (Figure 5-20b) par rapport à la structure sans (p)a-Si:H (Figure 5-20c). Sur la Figure 5-20c on observe notamment l'effet d'écrantage de la couche p qui induit un V_{bi} effectif, défini comme la chute de potentiel maximale dans la cellule. Maintenant si l'on compare les diagrammes de bandes des deux structures (Figure 5-20d) on peut voir que pour $W_{AZO} = 4.8 \text{ eV}$ le V_{bi} effectif est plus grand avec la couche p ($V_{bi} = 0.89 \text{ eV}$) que sans couche p ($V_{bi} = 0.82 \text{ eV}$). Nous avons vu dans la section précédente (4.3.3.1), que plus le V_{bi} de la cellule planaire est élevé, meilleur est le V_{oc} . Cela explique donc l'amélioration du V_{oc} pour les faibles valeurs de W_{AZO} . Au contraire, pour les fortes valeurs de W_{AZO} , par exemple pour $W_{AZO} = 5.2 \text{ eV}$, on peut voir (Figure 5-20d) que le V_{bi} commence à devenir plus faible en présence de la couche p, ce qui explique que pour $W_{AZO} > 5.1 \text{ eV}$ le V_{oc} du nanofil avec (p)a-Si:H est plus faible que celui sans cette couche.

En ce qui concerne le facteur de forme (Figure 5-18c) on voit que celui-ci change peu avec l'ajout de la couche p et que sa faible dépendance initiale avec le dopage du c-Si est supprimée. Le (p)a-Si:H joue donc le rôle d'une couche tampon qui améliore le rendement de la cellule complète pour les faibles travaux de sortie du contact arrière et dopages du c-Si (5-18d) en écrantant le champ électrique. L'apparition de cet écrantage peut s'expliquer par la présence d'un nombre important de défauts chargés dans le silicium amorphe fortement dopé [105]. En effet, en estimant la longueur de Debye (L_D) à partir de la densité d'états de défauts au niveau de Fermi du (p)a-Si:H, ici $N(E_f) = 3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, par la relation 5.10 nous trouvons une valeur d'environ 4.5 nm.

$$L_D = \sqrt{\frac{\varepsilon}{q^2 N(E_f)}} \quad (5.10)$$

où ε et q sont respectivement la permittivité diélectrique du matériau et la charge électrique élémentaire.

Par conséquent, à partir du moment où l'épaisseur de la couche de (p)a-Si:H (ici 10 nm) vaut plusieurs fois L_D , l'effet d'écrantage électrostatique a lieu. Ce dernier est suffisamment important dans la partie radiale où la quasi totalité de la chute de potentiel induite par la variation du dopage du c-Si de $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ à $8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ a lieu dans la couche p. Dans la partie planaire, l'effet de cet

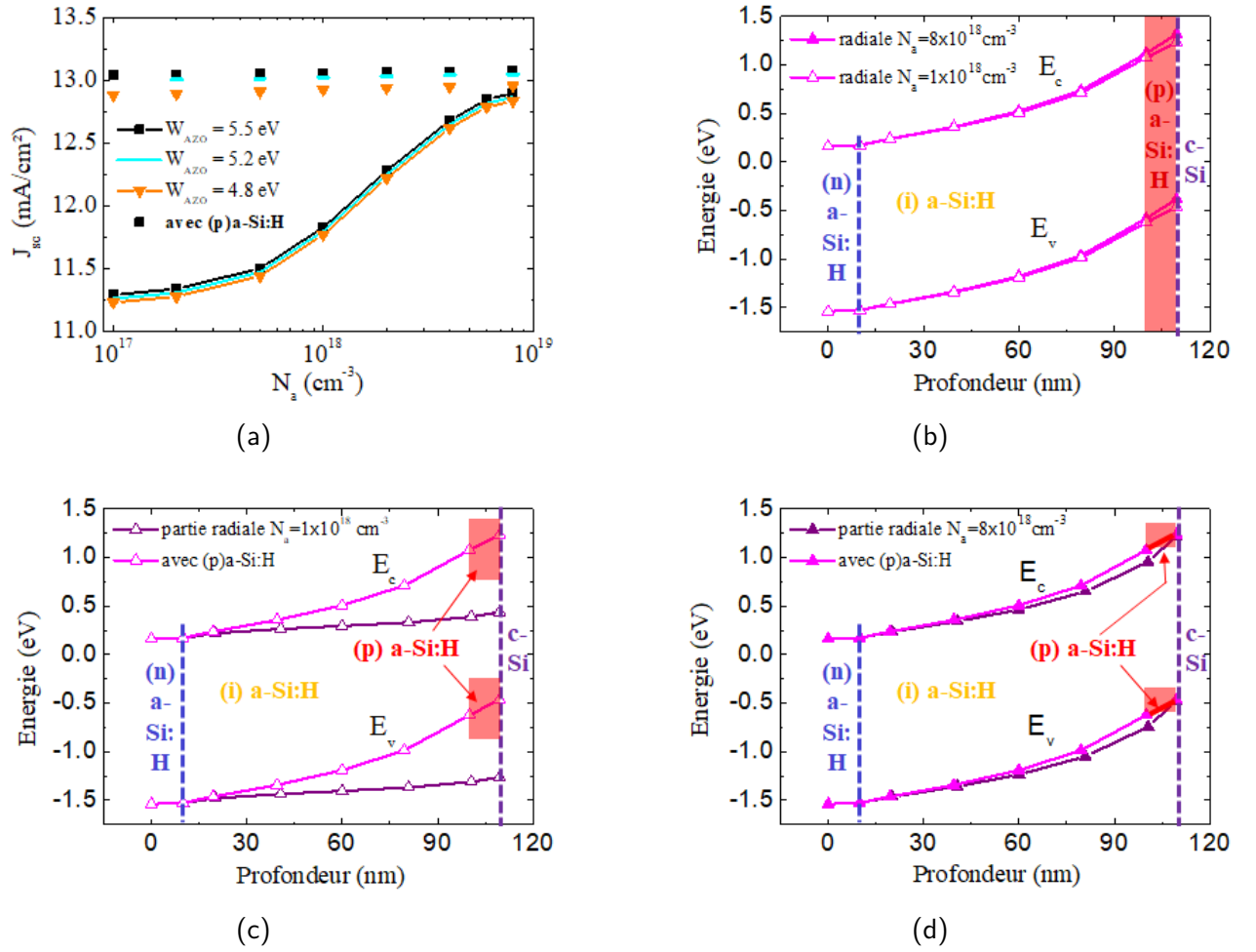


FIGURE 5-19 – Influence de la cellule radiale. (a) Variation du J_{sc} avec le dopage du silicium cristallin avec (symboles) et sans (lignes) (p)a-Si:H (N_a) pour trois valeurs de travail de sortie de l'AZO (W_{AZO}) (carrés noirs: 5.5 eV ; ligne cyan: 5.2 eV et triangles oranges: 4.8 eV). (b) DDB dans la partie radiale avec (p)a-Si:H pour deux valeurs de N_a (triangles creux: $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et triangles pleins: $8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$). (c) et (d) Comparaison des DDB avec (rose) et sans (p)a-Si:H (violet) pour $N_a = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et $N_a = 8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

écranage n'est pas suffisamment important pour rendre la cellule complètement insensible à W_{AZO} . Cependant, pour les faibles valeurs de W_{AZO} il permet d'absorber une bonne partie de la chute de potentiel (Figure 5-20d, étoiles) ce qui augmente le V_{bi} dans le (i)a-Si:H par rapport à la structure sans couche tampon, et par conséquent améliore le V_{oc} et l'efficacité. Au contraire, pour les valeurs plus élevées de W_{AZO} (> 5.1 eV lorsque $N_a = 8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$), l'écranage électrostatique joue en la défaveur du V_{oc} (Figure 5-20d, cercles) puisqu'il diminue le V_{bi} par rapport à la structure sans (p)a-Si:H. Par contre, lorsque $N_a = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, le V_{oc} en présence de la couche p devient plus faible qu'en son absence pour $W_{AZO} > 5.3$ eV. On observe donc, lorsque N_a diminue, un décalage

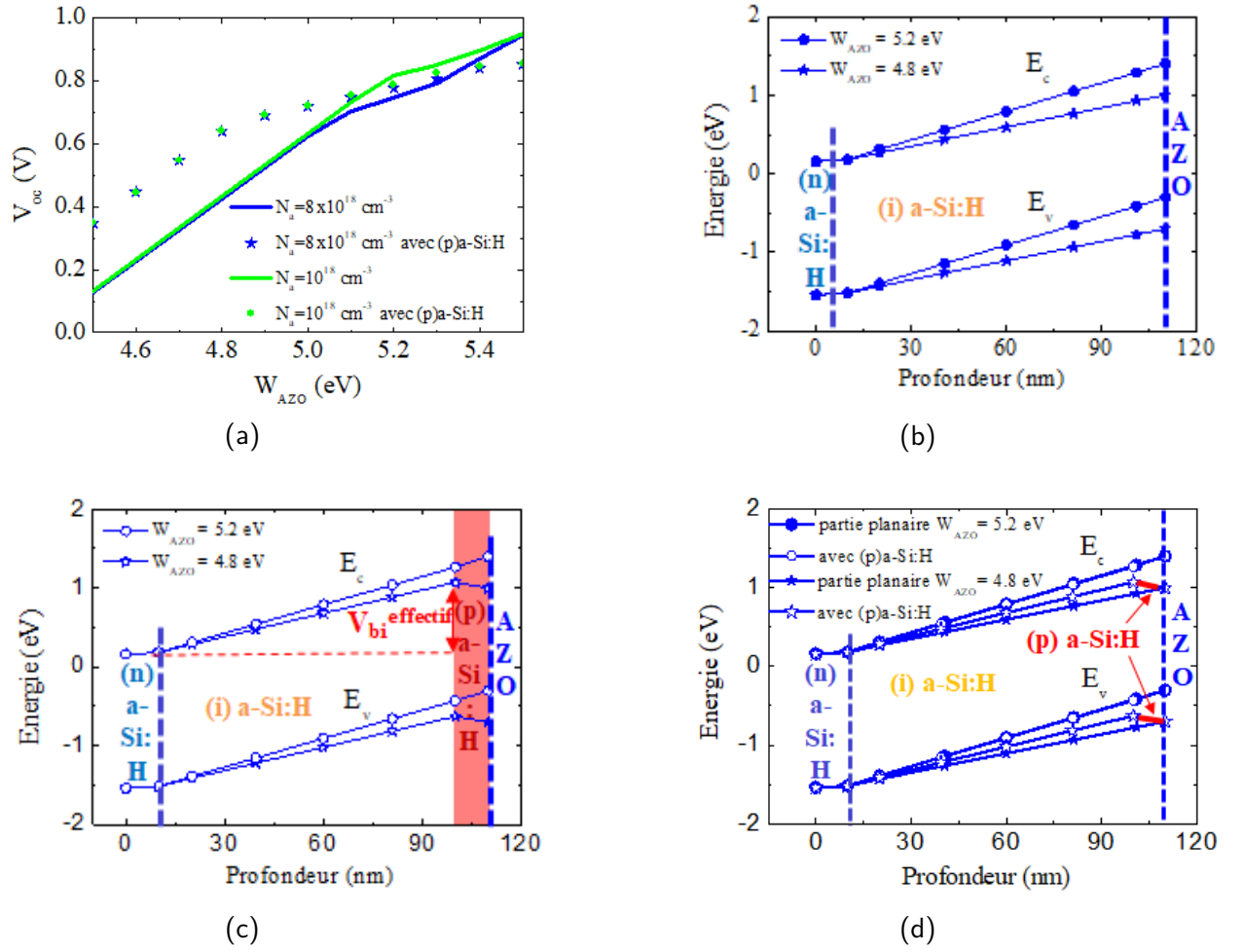


FIGURE 5-20 – Influence de la cellule planaire. (a) Variation du V_{oc} avec W_{AZO} pour deux valeurs de N_a (étoiles bleues: $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et cercles verts: $8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) avec (symboles) et sans (p)a-Si:H (lignes). (b) et (c) DDB dans la partie planaire respectivement sans (p)a-Si:H et avec (p)a-Si:H pour $W_{AZO} = 4.8 \text{ eV}$ (étoiles) et $W_{AZO} = 5.2 \text{ eV}$ (cercles) pour $N_a = 8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. (d) Comparaison des DDB avec (symboles creux) et sans (p)a-Si:H (symboles pleins) pour les deux valeurs de W_{AZO} .

vers les hauts W_{AZO} de se point particulier, où la présence du (p)a-Si:H devient défavorable au nanofil.

Afin de finaliser cette étude, nous étudions l'influence de la force de cet écrantage sur le V_{bi} dans les deux cellules (radiale et planaire). A cet effet, nous modifions la différence d'énergie entre le niveau de Fermi et la bande de valence ($E_f - E_v$) dans le (p)a-Si:H de $\pm 0.1 \text{ eV}$ autour de sa valeur initiale qui est de 0.39 eV . Dans ces conditions $N(E_f)$ vaut 1.5×10^{20} et $5.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ pour $E_f - E_v = 0.29$ et 0.49 eV respectivement. Les résultats de ces simulations sont représentés sur la Figure 5-21. Les diagrammes de bandes à l'équilibre sont montrés pour un dopage du c-Si de $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et un travail de sortie du contact arrière de 4.8 eV . On observe que le V_{bi} dans le (i)a-

Si:H des deux régions augmente lorsque $E_f - E_v$ décroît. Cela était attendu puisqu'une diminution de $E_f - E_v$ correspond à un plus fort dopage du (p)a-Si:H et donc à une différence de travaux de sortie aux bornes de (i)a-Si:H plus importante, ce qui conduit à un V_{bi} plus grand dans le (i)a-Si:H. Mais on observe également que l'effet d'écrantage est devenu plus important. En fait, un dopage plus important du (p)a-Si:H sous-entend aussi une couche plus défectueuse ($N(E_f)$ augmente). Par conséquent, d'après la relation 5.10, la longueur de Debye y diminue et l'effet d'écrantage devient d'autant plus fort, ce qui limite l'augmentation du V_{bi} et améliore le V_{oc} (Figure 5-22b).

En conclusion, plus la couche tampon sera défectueuse, plus l'effet d'écrantage sera fort et plus le V_{oc} et l'efficacité seront élevés pour les faibles valeurs de W_{AZO} , à condition que cette couche reste suffisamment fine pour assurer la collecte des porteurs au niveau des contacts.

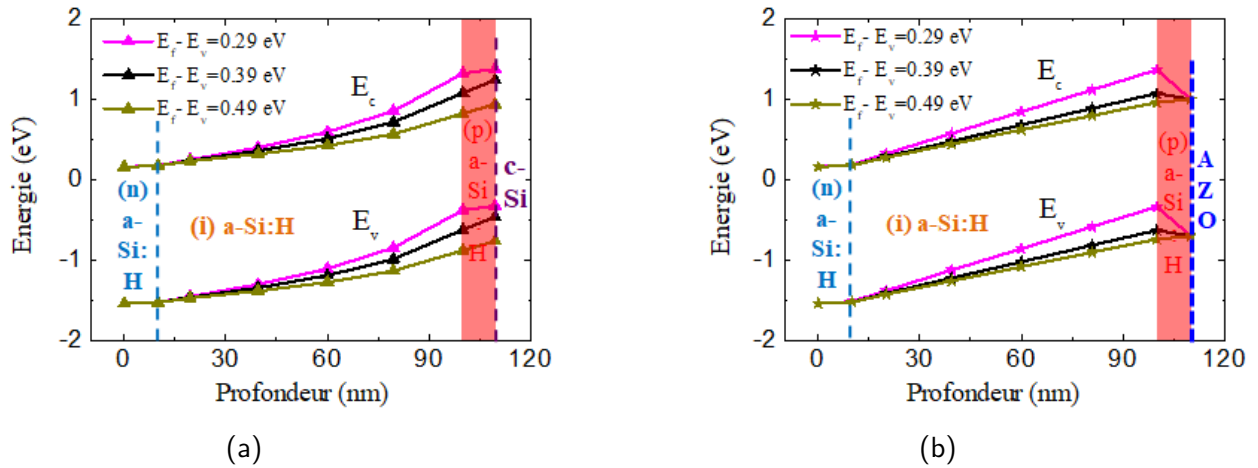


FIGURE 5-21 – DDB dans les parties (a) radiale avec $N_a = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et (b) planaire avec $W_{AZO} = 4.8 \text{ eV}$ pour trois valeurs de $E_f - E_v$ du (p)a-Si:H (noir: référence à 0.39 eV ; rose: 0.29 eV et jaune: 0.49 eV).

Nous avons vu dans cette partie que l'ajout d'une fine couche (10 nm) de silicium amorphe dopé P (couche tampon) permettait d'écranter le champ électrique des cellules planaire et radiale constituant la cellule complète à base de nanofils, et par conséquent créait une passivation par effet de champ. Celle-ci permet d'obtenir de meilleurs V_{oc} et rendements pour des faibles travaux de sortie du contact arrière comme cela peut être le cas pour l'Oxyde de Zinc dopé à l'Aluminium (AZO) utilisé dans nos cellules. Cette couche tampon permet ainsi d'effectuer une sélection du type de porteurs collectés par l'électrode en AZO. Le même effet d'amélioration du V_{oc} est d'ailleurs observé en simulant l'AZO comme contact sélectif. Un exemple pour des vitesses de recombinaisons de surface de $S_n = 50 \text{ cm.s}^{-1}$ et $S_p = 1 \times 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$ est représenté sur la Figure 5-23. Le J_{sc} et le

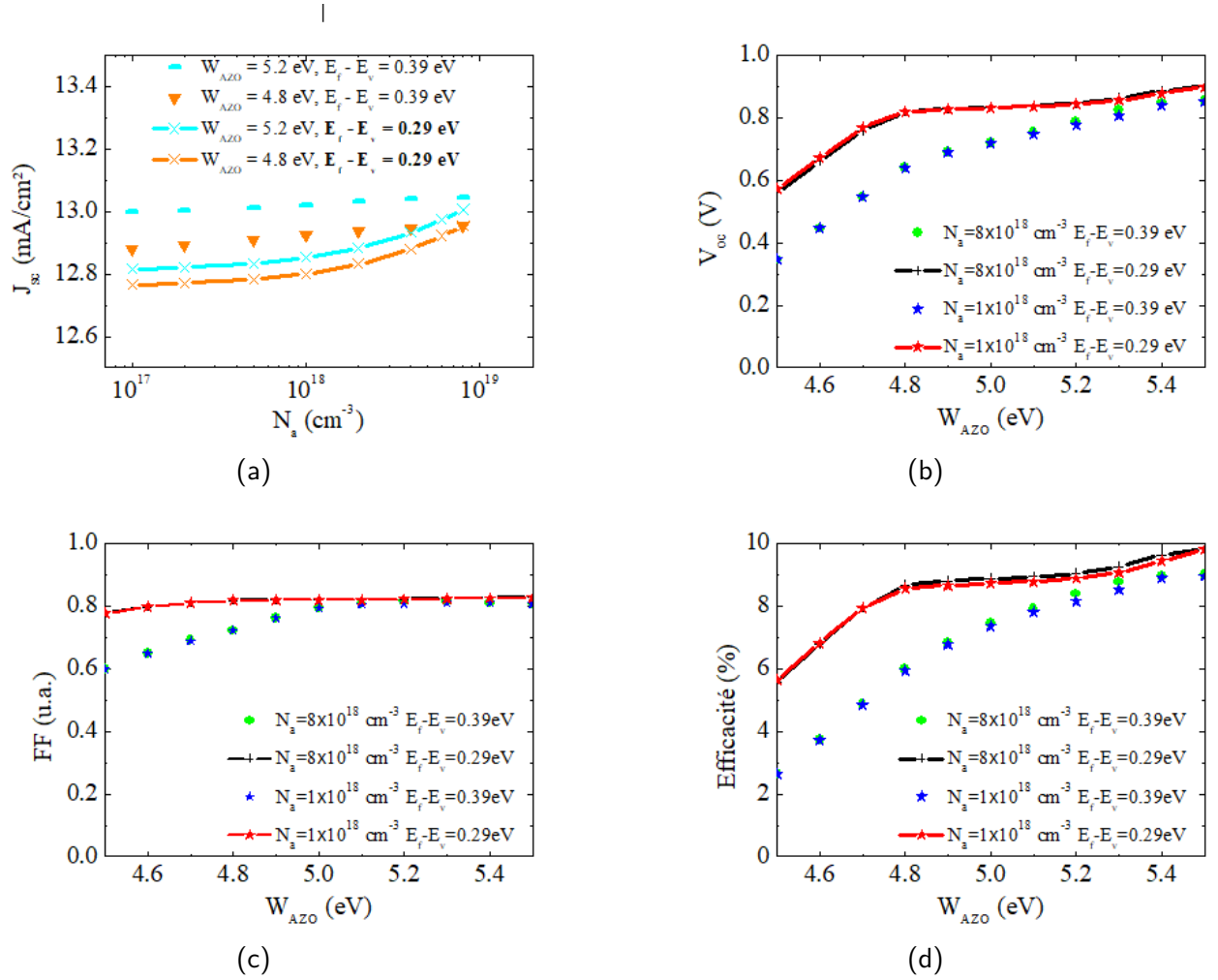


FIGURE 5-22 – Paramètres photovoltaïques de la cellule complète à base de nanofils avec (p)a-Si:H pour $E_f - E_v = 0.39 \text{ eV}$ (symboles; référence) et $E_f - E_v = 0.29 \text{ eV}$ (symboles + lignes). (a) Variation du J_{sc} avec le dopage du silicium cristallin (N_a) pour deux valeurs de travail de sortie de l'AZO (W_{AZO}) (cyan: 5.2 eV, orange: 4.8 eV). (b), (c) et (d) Variations du V_{oc} , du facteur de forme et de l'efficacité avec W_{AZO} pour deux valeurs de N_a (étoiles bleues et rouges: $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$; cercles verts et croix noires: $8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$).

facteur de forme n'ayant pratiquement pas changé nous n'avons représenté que le V_{oc} et l'efficacité que nous comparons aux résultats précédents sans contact sélectif. Nous voyons que c'est bien la propriété de collecte préférentielle d'un type de porteurs (ici les trous) plutôt que l'autre (les électrons) qui permet d'augmenter le V_{oc} et donc l'efficacité de la cellule complète pour les faibles travaux de sortie du contact arrière. Et c'est justement cette propriété qui est activée par l'ajout de la couche tampon (p)a-Si:H. On appelle couramment ce type de couche: BSF (Back Surface Field).

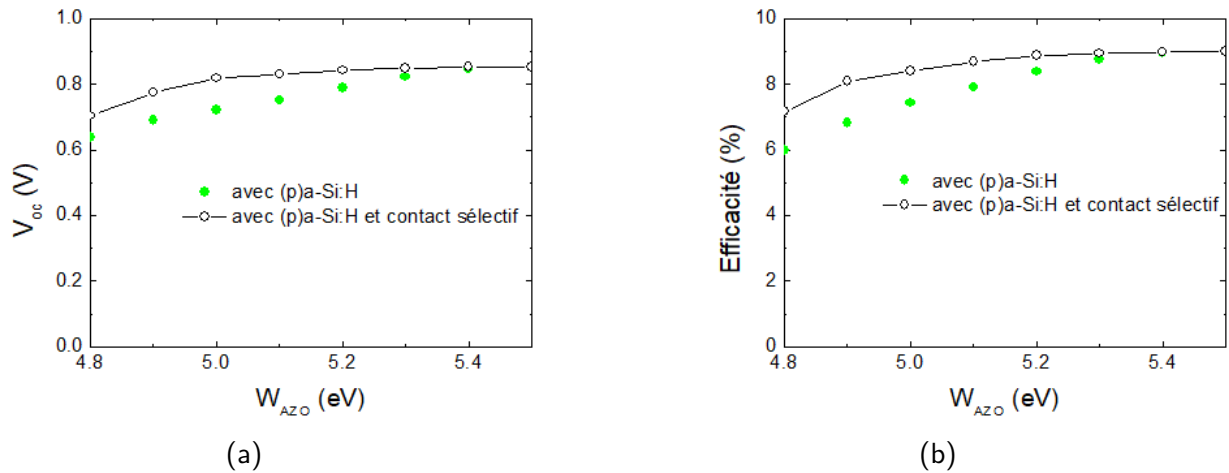
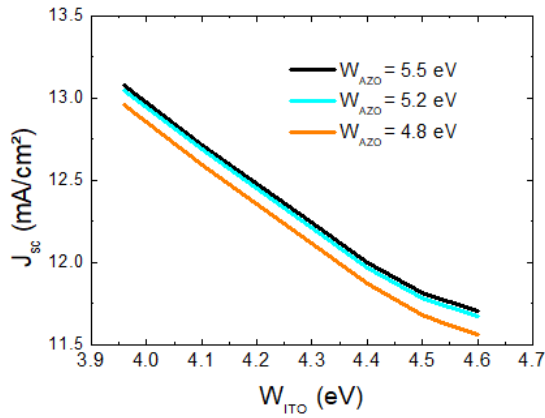


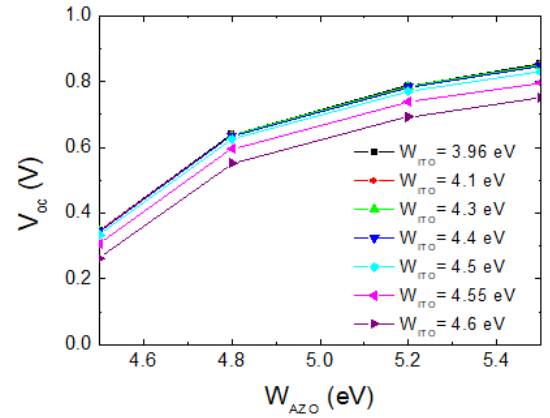
FIGURE 5-23 – Influence de la sélectivité du contact AZO. (a) V_{oc} et (b) efficacité de la cellule complète représentés en fonction de W_{AZO} pour $S_n = 50 \text{ cm.s}^{-1}$ et $S_p = 1 \times 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$ (courbe noire avec symboles creux) et comparés avec les résultats précédents sans contact sélectif (symboles verts).

Nous avons vu que les conditions de contact arrière (AZO) influencent fortement l'efficacité de la cellule à base de nanofils. La même question pourrait se poser concernant le contact avant (ITO) commun aux deux cellules radiale et planaire. Nous avons alors réalisé les simulations de l'évolution des performances de la cellule complète en fonction du travail de sortie de l'ITO (W_{ITO}). En effet W_{ITO} peut varier d'après la littérature entre 4.1 et 5.53 eV [106]. Dans l'étude précédente nous avons considéré des conditions de contact en bandes plates avec (n)a-Si:H, ce qui résulte en un W_{ITO} de 3.96 eV. Nous faisons donc varier cette valeur jusqu'à 4.6 eV, limite de convergence de nos calculs. Les recombinaisons aux contacts sont de nouveau pris comme infinis pour les deux types de porteurs. Les résultats de simulation sont représentés sur la Figure 5-24.

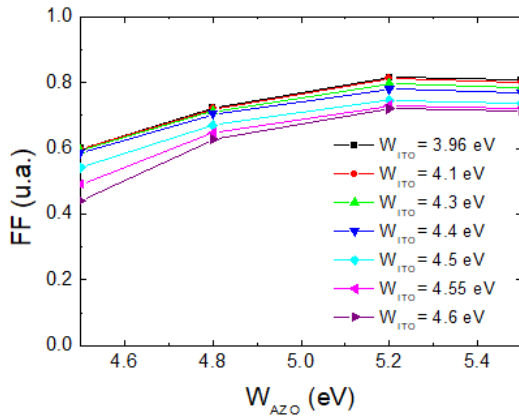
D'après ces résultats, le paramètre le plus impacté par l'augmentation de W_{ITO} est le J_{sc} (Figure 5-24a). En effet celui-ci passe de 13 mA.cm^{-2} à 11.5 mA.cm^{-2} pour $W_{ITO} = 3.96 \text{ eV}$ et $W_{ITO} = 4.6 \text{ eV}$ respectivement. Cela s'explique par l'augmentation de la barrière de potentiel dans le (n)a-Si:H que l'on peut visualiser sur les diagrammes de bandes à l'équilibre des deux types de



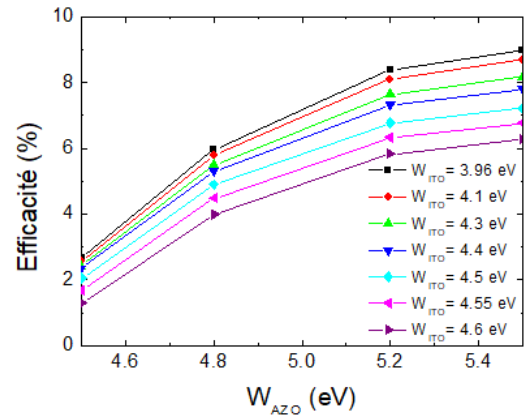
(a)



(b)



(c)



(d)

FIGURE 5-24 – Paramètres photovoltaïques de la cellule complète à base de nanofils avec (p)a-Si:H et différentes valeurs de travail de sortie de l'ITO (W_{ITO}). (a) Variation du J_{sc} avec W_{ITO} pour trois valeurs de travail de sortie de l'AZO (W_{AZO}) (courbe noire: 5.5 eV ; courbe cyan: 5.2 eV et courbe orange: 4.8 eV). (b), (c) et (d) Variations du V_{oc} , du facteur de forme et de l'efficacité avec W_{AZO} pour plusieurs valeurs de W_{ITO} allant de la condition de bandes plates (3.96 eV) à 4.6 eV. Le c-Si est dopé à $N_a = 8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et l'énergie d'activation du (p)a-Si:H est de 0.39 eV.

cellules (Figure 5-25a pour la radiale et 5-25b pour la planaire) et plusieurs valeurs de W_{ITO} . Son augmentation a alors deux effets: d'une part elle empêche la collecte d'une partie des électrons, et d'autre part elle favorise la collecte des trous photogénérés dans ou proche de cette région. Ces derniers ne sont donc pas collectés à l'électrode opposée, où ils devraient idéalement l'être.

Le V_{oc} (Figure 5-24b) et le facteur de forme (Figure 5-24c), eux, ne sont modifiés que pour les valeurs les plus hautes de W_{ITO} ($W_{ITO} > 4.4 \text{ eV}$). En effet, comme le (p)a-Si:H du côté de l'AZO, le (n)a-Si:H écrante le champ électrique du côté de l'ITO en fixant ainsi le V_{bi} pour $W_{ITO} < 4.4 \text{ eV}$. Nous pouvons observer cet effet sur les diagrammes de bandes à l'équilibre des cellules

radiale (5-25a) et planaire (5-25b). Cependant cet écrantage n'est pas suffisamment fort pour les conditions de travaux de sortie plus élevés (4.55 eV sur les figures), et le V_{oc} ainsi que le facteur de forme commencent à dépendre de la valeur de W_{ITO} . Nous avons vu dans l'étude précédente que le V_{oc} dépend de deux paramètres: le J_{sc} et le courant d'obscurité J_{obs} . Ici, contrairement à l'étude précédente où le J_{sc} ne variait quasiment pas avec W_{AZO} , nous avons à la fois une chute du J_{sc} avec l'augmentation de W_{ITO} (Figure 5-24a) et une variation de J_{obs} par le changement de V_{bi} pour $W_{ITO} > 4.4$ eV (Figure 5-26a). Pour $W_{ITO} < 4.4$ eV on voit sur la Figure 5-24a que le J_{sc} diminue de manière linéaire avec l'augmentation de W_{ITO} , puis décroît moins rapidement pour $W_{ITO} > 4.4$ eV. Au niveau de J_{obs} nous pouvons voir sur la Figure 5-26b (même figure que 5-26a mais pour 0.6 V $< V < 0.8$ V) que la différence de V_{oc} (représenté par des croix) provient du changement de régime du courant d'obscurité. En effet pour $W_{ITO} > 4.4$ eV, le V_{oc} se trouve dans le régime où J_{obs} ne dépend plus du V_{bi} mais d'une résistance série.

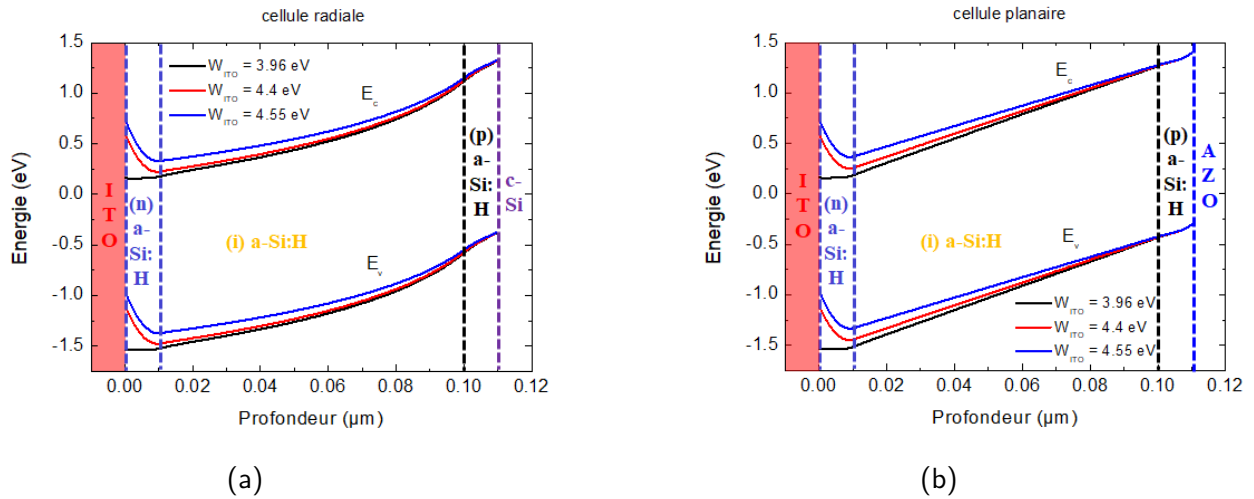


FIGURE 5-25 – DDB à l'équilibre des cellules (a) radiale et (b) planaire, pour trois valeurs de W_{ITO} . Ici W_{AZO} vaut 5.2 eV.

Par conséquent l'efficacité de la cellule complète (Figure 5-24d) est assez sensible au travail de sortie de l'ITO que ce soit pour les faibles valeurs de W_{ITO} (≤ 4.4 eV) où elle suit les variations du J_{sc} , et pour les fortes valeurs de W_{ITO} (> 4.4 eV) où le V_{oc} entre en jeu.

5.4 Conclusions et perspectives

Dans cette étude sur les cellules à base de nanofils de silicium nous avons en premier lieu réalisé des simulations des performances d'un nanofil seul (sans prendre en compte le réseau) en fonction de

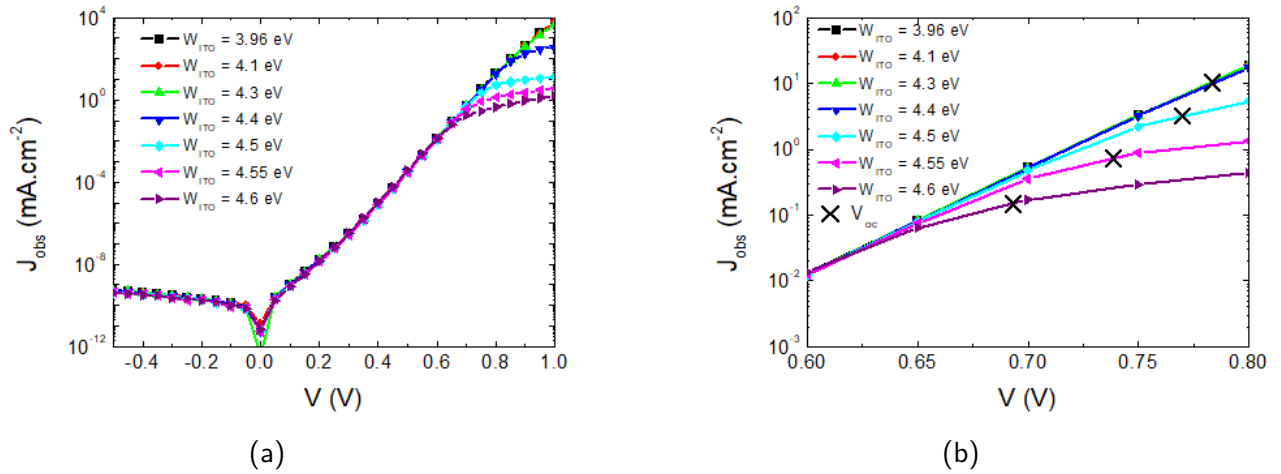


FIGURE 5-26 – Variation de la densité de courant d'obscurité (J_{obs} en fonction de la tension pour sept valeurs de W_{ITO} allant de 3.96 eV (conditions de bandes plates avec (n)a-Si:H) à 4.6 eV. Ici W_{AZO} vaut 5.2 eV. (a) $-0.5 V < V < 1 V$, (b) $0.6 V < V < 0.8 V$ où le V_{oc} est indiqué par une croix sur chaque courbe.

l'épaisseur du matériau absorbeur, et que nous avons comparé avec une cellule planaire équivalente. Cela nous a permis de montrer l'intérêt des nanofils d'un point de vue électrique: la collecte de porteurs photogénérés (radiale) étant découplée de l'absorption de photons (verticale) rend le nanofil plus efficace que la structure planaire pour des faibles épaisseurs d'absorbeur ($< 300 nm$).

Puis, afin de prendre en compte les effets du réseau sur notre nanofil, nous avons effectué un couplage avec les simulations optiques. Ce couplage a été réalisé par le développement d'une fonction permettant d'importer dans le logiciel ATLAS un taux de photogénération calculé par la méthode RCWA avec l'outil RETICOLO. En effet, pour modéliser un nanofil avec ATLAS nous utilisons la symétrie de révolution autour de l'axe central du nanofil. Cela permet de gagner en temps de calcul et évite les simulations en 3D, très consommatrices en temps de calcul et mémoire disque, mais aussi beaucoup plus difficiles à mettre en oeuvre car elles nécessitent un savoir-faire spécifique (que nous n'avons pas dans l'équipe). Le développement de cette fonction a donc été nécessaire pour effectuer l'import pour notre structure modélisée en coordonnées cylindriques. Ainsi, ce couplage nous permet de prendre en compte, dans le calcul des performances, le gain d'absorption issu des modes optiques créés par le réseau de nanofils. Nous avons notamment vu que la densité de courant optique obtenue est multipliée par un facteur deux par rapport à la simulation où le réseau n'était pas considéré.

Une fois ce couplage effectué, nous nous sommes intéressé de manière plus approfondie à la

cellule du projet SOLARIUM. Nous avons notamment remarqué que la méthode de croissance des nanofils créait une cellule planaire entre eux. Nous avons donc décidé d'étudier l'influence de cette cellule planaire sur les performances de la cellule complète (nanofils + planaire). Afin de mettre en évidence cette influence nous avons fait varier deux paramètres propres à chaque type de cellule: le travail de sortie du contact arrière pour la planaire, et le dopage du silicium cristallin pour la radiale. Nous avons ainsi montré que le V_{oc} était très affecté par la cellule planaire. En effet, pour des travaux de sortie du contact arrière faibles ($W_{AZO} < 5 \text{ eV}$), le V_{oc} et par conséquent l'efficacité de la cellule sont fortement dégradés. Nous avons montré que cet effet était dû à une résistivité plus faible dans la cellule planaire comparée à la cellule radiale. Par conséquent cela engendrait un courant d'obscurité important dans cette région. En revanche, le J_{sc} est majoritairement impacté par le dopage du silicium cristallin, et donc la cellule radiale. En effet, l'augmentation du dopage engendre une augmentation du champ électrique radial et par conséquent améliore la collecte des porteurs photogénérés dans le nanofil.

Expérimentalement, l'ajout d'une fine couche de (p)a-Si:H, entre le coeur en silicium cristallin et l'absorbeur en (i)a-Si:H, a permis d'augmenter la valeur du V_{oc} . Nous avons donc également simulé ce cas de figure. Nous avons alors montré que cette couche de (p)a-Si:H jouait le rôle d'une couche tampon en écrantant les effets du contact arrière pour la cellule planaire et les effets du dopage du c-Si pour la cellule radiale. Il en résulta une indépendance quasi-totale du J_{sc} avec le dopage du c-Si et une moindre influence de W_{AZO} sur le V_{oc} . Nous avons notamment observé une amélioration du V_{oc} pour les faibles valeurs de W_{AZO} . Cela est donc en accord avec les observations expérimentales et nous permet de conclure que l'effet de passivation de cette couche, mis à part son effet potentiel de réduction de défauts d'interface, agit également par effet de champ.

Dans un troisième temps, vu l'impact important que pouvaient avoir les conditions de contact avec l'AZO et le c-Si, nous avons étudié l'influence du contact en ITO commun aux deux cellules. Nous avons vu que, comme attendu, le J_{sc} diminuait avec l'augmentation de W_{ITO} en raison de la création d'une barrière de plus en plus importante pour la collecte des électrons. Mais il y a également un deuxième effet qui est l'augmentation de la collecte à cette électrode des trous photogénérés dans la couche de (n)a-Si:H ou à sa proximité. Cela représente autant de trous en moins collectés par l'AZO et donc peut également engendrer une baisse du J_{sc} . Concernant le V_{oc} , nous avons vu qu'au delà d'un $W_{ITO} > 4.4 \text{ eV}$ il n'était plus régi par le V_{bi} mais par une résistance série du dispositif. Cela a notamment pour effet de faire chuter le V_{oc} .

La méthode de couplage entre les simulations électriques et optiques appliquée au logiciel ATLAS dans le cadre de cette thèse, ainsi que l'étude qui en découle permettent d'ouvrir la voie à plusieurs perspectives. Tout d'abord, cela offre la possibilité de pouvoir modéliser à la fois de manière électrique et optique la future cellule à nanofils tandem a-Si:H/ μ c-Si:H (Figure 5-1) ou d'autres types de structures équivalentes, simuler les performances attendues et déterminer son design idéal. Cependant, pour réaliser ces simulations il faut d'abord être capable de modéliser d'un point de vue électrique le silicium micro-cristallin (et donc bien connaître ses propriétés), et effectuer les simulations optiques (savoir-faire que nous n'avons pas dans l'équipe). D'autre part, cette méthode pourra également permettre de déterminer les points faibles de la structure d'un point de vue électrique, tout comme nous l'avons vu concernant la partie planaire située entre les nanofils et qui influence l'efficacité de la cellule complète.

Chapitre 6

Conclusions et perspectives

Nous nous sommes intéressés dans cette thèse aux cellules solaires à base d'hétérojonctions de silicium amorphe/ cristallin sous forme planaire et sous forme de nanofils à jonction radiale. Ces deux technologies ont un intérêt car elles permettent d'augmenter le rendement photovoltaïque par rapport à une cellule en silicium cristallin conventionnelle, mais aussi de réduire leurs coûts de production. Nous avons étudié une série d'échantillons composés de l'hétérojonction (p)a-Si:H/(i)a-Si:H/(n)c-Si d'épaisseur de (i)a-Si:H variable en entre 0 et 50 nm, représentant ainsi une gamme de variation à la fois de la densité de défauts à l'interface amorphe/cristallin, et de la zone d'inversion. Dans la première étude de la thèse nous avons commencé par caractériser les hétérojonctions de nos échantillons par les techniques de conductance, photoluminescence modulée (MPL) et déclin de photoconductivité. En simulant la technique de conductance nous avons déterminé les courbures de bandes à l'interface, par l'intermédiaire de la grandeur $E_f - E_v$, et les densités de défauts profonds (N_{DB}) des fines couches de (i)a-Si:H correspondantes. Nous avons ensuite développé un modèle semi-analytique pour simuler en 2D la technique MPL. Celui-ci nous a permis d'estimer la densité d'états de défauts de nos échantillons, pour une durée de vie du bulk de 10 ms, en faisant correspondre les résultats expérimentaux aux simulations.

Puis nous avons apporté quelques précisions sur l'application de la technique MPC aux cellules à hétérojonctions de silicium. Nous avons montré à l'aide simulations numériques que cette technique est bien sensible aux défauts d'interface. Dans notre modèle, ces défauts sont représentés à la fois par leur densité à l'interface (D_{it}) et par les défauts profonds (N_{DB}) que nous avons introduit dans le (i)a-Si:H pour faire correspondre nos simulations de conductance avec les observations expérimentales. Nous avons également estimé, par correspondance entre les mesures et les simulations MPC, les valeurs de D_{it} correspondant à chaque échantillon. Nous avons notamment montré que ces valeurs de D_{it} permettaient également de reproduire les résultats des mesures MPL, montrant ainsi une cohérence entre les résultats issus des deux types de mesures.

D'autre part, nous avons vu que les valeurs des temps caractéristiques obtenus par les techniques MPC et MPL sont différentes. Par conséquent, les grandeurs physiques mesurées semblent être différentes. La technique MPL caractérise la durée de vie différentielle effective des porteurs minoritaires du bulk cristallin, celle-ci étant affectée en présence d'une grande densité de défauts à l'interface. Nous avons donc étudié par simulations la sensibilité de la MPC à la durée de vie des porteurs dans le bulk. Nous en avons conclu que la variation de τ_{bulk} affectait peu τ_{MPC} . Nous avons également pu montrer grâce aux simulations que le courant modulé dépend de la mobilité des

trous mais pas de celle des électrons. Cela indique que la MPC est *a priori* bien sensible à la zone d'inversion proche de l'interface où les porteurs majoritaires sont les trous. Pour finir, nous avons effectué une étude expérimentale de la variation de τ_{MPC} en fonction du flux et de la température. Nous avons alors pu remarquer quelques tendances mais pour les expliquer avec les simulations nous avons besoin d'améliorer notre modèle.

En perspective, les améliorations du modèle de simulation devraient également pouvoir nous aider à conclure si la technique MPC permet la détermination, de manière directe ou indirecte, des densités de défauts d'interface. D'autre part, seul le régime des basses fréquences a été étudié ici, mais nous avons vu que le régime à hautes fréquences présente une remontée du déphasage que nous ne savons pas expliquer à ce jour. Une deuxième perspective de ces travaux est donc de relier cette remontée à un phénomène physique.

Dans la seconde étude de cette thèse, sur les cellules à base de nanofils de silicium nous avons en premier lieu réalisé des simulations des performances d'un nanofil seul (sans prendre en compte le réseau) en fonction de l'épaisseur du matériau absorbeur, et que nous avons comparé avec une cellule planaire équivalente. Cela nous a permis de montrer l'intérêt des nanofils d'un point de vue électrique: la collecte de porteurs photogénérés (radiale) étant découplée de l'absorption de photons (verticale) rend le nanofil plus efficace que la structure planaire pour des faibles épaisseurs d'absorbeur ($< 300 \text{ nm}$).

Puis, afin de prendre en compte les effets du réseau sur notre nanofil, nous avons effectué un couplage avec les simulations optiques. Ce couplage a été réalisé par le développement d'une fonction permettant d'importer dans le logiciel ATLAS un taux de photogénération calculé par la méthode RCWA avec l'outil RETICOLO. Il nous permet de prendre en compte, dans le calcul des performances, le gain d'absorption issu des modes optiques créés par le réseau de nanofils.

Une fois ce couplage effectué, nous nous sommes intéressé de manière plus approfondie à la cellule du projet SOLARIUM. Nous avons notamment remarqué que la méthode de croissance des nanofils créait une cellule planaire entre eux. Nous avons donc décidé d'étudier l'influence de cette cellule planaire sur les performances de la cellule complète (nanofils + planaire). Afin de mettre en évidence cette influence nous avons fait varier deux paramètres propres à chaque type de cellule: le travail de sortie du contact arrière pour la planaire, et le dopage du silicium cristallin pour la radiale. Nous avons ainsi montré que le V_{oc} était très affecté par la cellule planaire. En effet, pour

des travaux de sortie du contact arrière faibles ($W_{AZO} < 5 \text{ eV}$), le V_{oc} et par conséquent l'efficacité de la cellule sont fortement dégradés. Nous avons montré que cet effet était dû à une résistivité plus faible dans la cellule planaire comparée à la cellule radiale. Par conséquent cela engendrait un courant d'obscurité important dans cette région. En revanche, le J_{sc} est majoritairement impacté par le dopage du silicium cristallin, et donc la cellule radiale. En effet, l'augmentation du dopage engendre une augmentation du champ électrique radial et par conséquent améliore la collecte des porteurs photogénérés dans le nanofil.

Expérimentalement, l'ajout d'une fine couche de (p)a-Si:H, entre le coeur en silicium cristallin et l'absorbeur en (i)a-Si:H, a permis d'augmenter la valeur du V_{oc} . Nous avons donc également simulé ce cas de figure. Nous avons alors montré que cette couche de (p)a-Si:H jouait le rôle d'une couche tampon en écrantant les effets du contact arrière pour la cellule planaire et les effets du dopage du c-Si pour la cellule radiale. Nous avons notamment observé une amélioration du V_{oc} pour les faibles valeurs de W_{AZO} . Cela est donc en accord avec les observations expérimentales et nous permet de conclure que l'effet de passivation de cette couche, mis à part son effet potentiel de réduction de défauts d'interface, agit également par effet de champ.

Dans un troisième temps, vu l'impact important que pouvaient avoir les conditions de contact avec l'AZO et le c-Si, nous avons étudié l'influence du contact en ITO commun aux deux cellules. Nous avons vu que, comme attendu, le J_{sc} diminuait avec l'augmentation de W_{ITO} en raison de la création d'une barrière de plus en plus importante pour la collecte des électrons. Mais il y a également un deuxième effet qui est l'augmentation de la collecte à cette électrode des trous photogénérés dans la couche de (n)a-Si:H ou à sa proximité. Cela représente autant de trous en moins collectés par l'AZO et donc peut également engendrer une baisse du J_{sc} . Concernant le V_{oc} , nous avons vu qu'au delà d'un $W_{ITO} > 4.4 \text{ eV}$ il n'était plus régi par le V_{bi} mais par une résistance série du dispositif. Cela a notamment pour effet de faire chuter le V_{oc} .

La méthode de couplage entre les simulations électriques et optiques appliquée au logiciel ATLAS dans le cadre de cette thèse, ainsi que l'étude qui en découle permettent d'ouvrir la voie à plusieurs perspectives. Tout d'abord, cela offre la possibilité de pouvoir modéliser à la fois de manière électrique et optique la future cellule à nanofils tandem a-Si:H/ μ c-Si:H ou d'autres types de structures équivalentes, simuler les performances attendues et déterminer son design idéal. Cependant, pour réaliser ces simulations il faut d'abord être capable de modéliser d'un point de vue électrique le silicium micro-cristallin (et donc bien connaître ses propriétés), et effectuer les simulations optiques

(savoir-faire que nous n'avons pas dans l'équipe). D'autre part, cette méthode pourra également permettre de déterminer les points faibles de la structure d'un point de vue électrique, tout comme nous l'avons vu concernant la partie planaire située entre les nanofils et qui influence l'efficacité de la cellule complète.

Annexes

Annexe A

Description des paramètres de modélisation des défauts dans le a-Si:H

Les distributions des états dans les queues de bandes (g_{TA} , g_{TD}) et les gaussiennes (g_{GA} , g_{GD}) du silicium amorphe en fonction de l'énergie (E) sont données par les relations ci-dessous:

$$g_{TA}(E) = N_{TA} e^{\frac{E-E_c}{\omega_{TA}}} \quad (\text{A.1})$$

$$g_{TD}(E) = N_{TD} e^{\frac{E_v-E}{\omega_{TD}}} \quad (\text{A.2})$$

$$g_{GA}(E) = N_{GA} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{E_{GA}-E}{\omega_{GA}}\right)^2} \quad (\text{A.3})$$

$$g_{GD}(E) = N_{GD} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{E-E_{GD}}{\omega_{GD}}\right)^2} \quad (\text{A.4})$$

N_T et ω_T sont respectivement le préfacteur de l'exponentielle, et l'énergie caractéristique, modélisant la queue de bande. N_G et ω_G sont respectivement le maximum, et l'énergie du pic, de la distribution gaussienne. E_G est l'énergie du maximum de la distribution gaussienne. Les indices A et D correspondent aux termes Accepteur et Donneur. E_c et E_v sont les énergies de la bande de conduction et de la bande de valence respectivement.

Cependant dans ATLAS, les distribution gaussiennes sont définies de manière légèrement différente que les expressions usuelles ci-dessus. En, effet elles s'expriment sans le facteur 1/2 dans l'exponentielle:

$$g_{GA}(E) = N_{GA} e^{-\left(\frac{E_{GA}-E}{\omega_{GA}}\right)^2} \quad (\text{A.5})$$

$$g_{GD}(E) = N_{GD} e^{-\left(\frac{E-E_{GD}}{\omega_{GD}}\right)^2} \quad (\text{A.6})$$

Par conséquent, les valeurs de ω_G entrées dans ATLAS correspondent à la valeur mise dans les tableaux indiquant nos paramètres de simulation de la DOS multipliée par $\sqrt{2}$.

Annexe B

Modèle analytique de la conductance appliqué à une hétérojonction

Le modèle analytique complet est décrit dans [23]. Nous précisons ici les relations utilisées pour décrire l'évolution de la conductance d'une hétérojonction en fonction de la valeur de $E_f - E_v$ à l'interface.

La conductance normalisée s'exprime par la relation:

$$G_{norm} = q\mu_p \int_0^\infty (p(x) - p(\infty))dx \quad (\text{B.1})$$

où q est la charge électrique élémentaire, μ_p la mobilité des trous, et p leur concentration définie par:

$$p = n_i e^{-\frac{E_f - E_i}{kT}} \quad (\text{B.2})$$

où k est la constante de Boltzmann, T la température, $n_i^2 = np$ est la concentration intrinsèque de porteurs à l'équilibre, et E_i est l'énergie du milieu du gap.

En posant $u(x)$ tel que:

$$u(x) = \frac{E_f - E_i(x)}{kT} \quad (\text{B.3})$$

Nous effectuons un changement de variable dans la relation B.1:

$$G_{norm} = q\mu_p \int_{u_0}^{u_\infty} (p(x) - p(\infty)) \left(\frac{dx}{du} \right) du \quad (\text{B.4})$$

Le résultat de ce calcul, donné dans [23], est:

$$G_{norm} = q\mu_p n_i \int_{u_0}^{u_\infty} \frac{e^{-u}}{\sqrt{\frac{2}{L_D^2} [\cosh u - \cosh u_\infty - (u - u_\infty) \sinh u_\infty]}} du \quad (\text{B.5})$$

où L_D est la longueur de Debye définie par:

$$\frac{1}{L_D^2} = \frac{2q^2 n_i}{\varepsilon kT} \quad (\text{B.6})$$

avec ε la constante diélectrique du matériau.

Afin de calculer u_∞ nous appliquons la propriété de neutralité de la charge à l'infini ρ définie par:

$$\rho = p - n + N_d = 0 \quad (\text{B.7})$$

où N_d est le dopage du bulk, p et n sont les concentrations de trous et d'électrons à l'équilibre dans le bulk avec $p = n_i e^{-u_\infty}$ et $n = n_i e^{u_\infty}$.

L'équation B.7 se ré-écrit donc:

$$n_i e^{-u_\infty} - n_i e^{u_\infty} + N_d = 0 \quad (\text{B.8})$$

La solution de cette équation est:

$$\boxed{u_\infty \approx \ln \left(\frac{N_D}{n_i} \right)} \quad (\text{B.9})$$

Pour finir, nous relient la grandeur u_0 à $E_f - E_v$ à l'interface par:

$$u_0 = \frac{E_f - E_i(0)}{kT} = \frac{E_f - E_v(0) + E_v(0) - E_i(0)}{kT} \quad (\text{B.10})$$

$$(E_f - E_v)_{int} = E_f - E_v(0) = kT(u_0 + (E_i - E_v)) \quad (\text{B.11})$$

$$E_i - E_v = kT \ln \left(\frac{N_v}{n_i} \right) \quad (\text{B.12})$$

$$\boxed{(E_f - E_v)_{int} = kT \left(u_0 + \ln \left(\frac{N_v}{n_i} \right) \right)} \quad (\text{B.13})$$

où N_v est la densité d'états effective dans la bande de valence.

Annexe C

Principe de la mesure du Déclin de PhotoConductance (PCD)

La mesure du Déclin de PhotoConductance (PCD) [71, 72] consiste à illuminer l'échantillon avec un flash de lumière et mesurer la réponse temporelle de la photoconductance. Cette mesure est effectuée avec l'appareil Sinton WCT-120 dont un schéma de principe est représenté sur la Figure C-1.

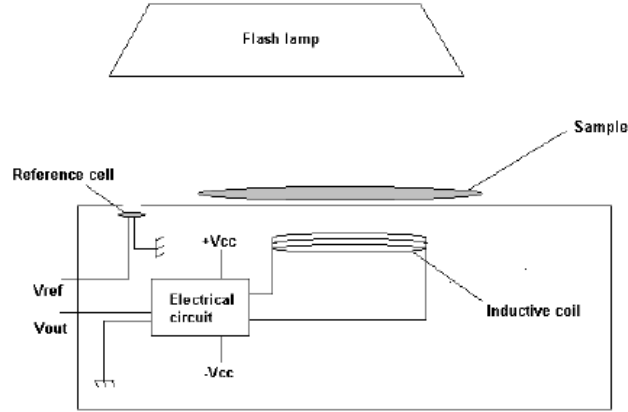


FIGURE C-1 – Représentation schématique de la mesure de PCD avec l'appareil Sinton WCT-120.

La cellule à étudier est placée à proximité immédiate d'une bobine initialement parcourue par un courant. L'excitation lumineuse issue de la lampe qui se trouve au dessus génère des courants de Foucault dans l'échantillon. Ces derniers ont pour effet de modifier l'impédance de la bobine. Le circuit électronique situé dans l'appareil permet de délivrer une tension proportionnelle à cette impédance. Cette tension V_{out} est reliée à la photoconductance carrée par la relation:

$$\Delta\sigma_{\square}(t) = a (V_{out}(t) - V_{offset})^2 + b (V_{out}(t) - V_{offset}) \quad (C.1)$$

où V_{offset} est la tension à vide de l'appareil mesurée en absence d'échantillon, et a et b sont des constantes de l'appareil déterminés en sortie d'usine et qui dépendent des dimensions de la bobine ainsi que de sa distance par rapport à l'échantillon.

Cette photoconductance est reliée à la concentration de porteurs minoritaires en excès créés dans l'échantillon par la relation:

$$\Delta\sigma_{\square}(t) = q(\mu_n\Delta n(z,t) + \mu_p\Delta p(z,t)) d \quad (C.2)$$

Dans le cas d'un échantillon à hétérojonction de silicium la technique PCD permet de mesurer la photoconductance dans le wafer de silicium cristallin. En considérant que l'on photogénère autant

d'électrons que de trous ($\Delta n = \Delta p$) et qu'étant donné la faible épaisseur du wafer (de l'ordre d'une centaine de micromètres) l'éclairement se fait de manière quasi-homogène en z , la relation C.2 peut se réécrire comme:

$$\Delta\sigma_{\square}(t) = q\Delta p_{moy}(t)(\mu_n + \mu_p) d_{c-Si} \quad (C.3)$$

En appliquant l'équation de continuité sans champ électrique extérieur nous obtenons:

$$\frac{d\Delta p_{moy}(t)}{dt} = G_{moy}(t) - R_{moy}(t) \quad (C.4)$$

$$\frac{d\Delta p_{moy}(t)}{dt} = G_{moy}(t) - \frac{d\Delta p_{moy}(t)}{\tau_{eff}} \quad (C.5)$$

On réexprime cette équation pour obtenir l'expression de τ_{eff} :

$$\tau_{eff} = \frac{\Delta p_{moy}(t)}{G_{moy}(t) - \frac{d\Delta p_{moy}(t)}{dt}} \quad (C.6)$$

Et pouvons la relier à la photoconductance mesurée en utilisant l'équation C.3:

$$\tau_{eff} = \frac{\Delta\sigma_{\square}(t)}{q(\mu_n + \mu_p) d_{c-Si} G_{moy}(t) - \frac{d\Delta\sigma_{\square}(t)}{dt}} \quad (C.7)$$

G_{moy} est déterminée grâce à une photodiode de référence placée dans l'appareil de mesure. La mesure du déclin de photoconductance permet donc de déterminer la durée de vie effective des porteurs dans le silicium cristallin de l'hétérojonction en fonction de leur taux d'injection.

Selon la durée du flash, i.e. court ou long, l'expression de τ_{eff} peut se simplifier de deux manières. Si le flash est long ($\tau = 2 \text{ ms}$) la mesure peut être apparentée à un régime quasi-statique, on parle alors de QSSPC pour Quasi-Steady State PhotoConductance. Dans ce cas $\frac{d\Delta p_{moy}(t)}{dt} = 0$ et la relation C.7 se simplifie ainsi:

$$\tau_{eff,qss} = \frac{\Delta\sigma_{\square}(t)}{q(\mu_n + \mu_p) d_{c-Si} G_{moy}(t)} \quad (C.8)$$

En revanche si le flash est court ($\tau = 10 - 20 \text{ } \mu s$) la mesure est apparentée au régime transitoire et τ_{eff} s'exprime alors:

$$\tau_{eff,trans} = - \frac{\Delta\sigma_{\square}(t)}{\frac{d\Delta\sigma_{\square}(t)}{dt}} \quad (C.9)$$

La mesure en mode QSSPC permet donc de déterminer de manière directe la durée de vie effective des porteurs dans l'échantillon alors que le mode transitoire en donne la dérivée. Il semble donc préférable d'utiliser un flash long. Or on voit dans l'expression C.7 que l'analyse des résultats nécessite la connaissance du taux de photogénération et donc du coefficient de réflexion du matériau. La durée de vie effective extraite dans ce mode est donc sujette aux incertitudes liées à l'optique. De plus, étant donné la durée du flash seuls les échantillons dont la durée de vie est inférieure à 200 μs peuvent être analysés en régime QSS. Or les cellules à hétérojonction fabriquées de nos jours ont des durées de vie effectives supérieures à la milliseconde, par conséquent la mesure PCD doit être faite en régime transitoire. Inversement, ce régime ne peut s'appliquer qu'aux cellules de durées de vie effectives inférieures à 100 μs car le nombre de porteurs en excès doit être suffisant pour que la mesure de décroissance soit correcte. L'avantage de ce mode est que son analyse est complètement indépendante du facteur optique.

Annexe D

Définition des paramètres clés définissant les performances d'une cellule photovoltaïque

Les paramètres clés définissant les performances d'une cellule photovoltaïque sont déterminés à partir de la caractéristique densité de courant - tension dont un exemple schématique est donné sur la Figure D-1. Cette courbe est obtenue en mesurant le courant extrait de la cellule en fonction de la polarisation appliquée. La cellule est soumise à un éclairement simulant le spectre solaire.

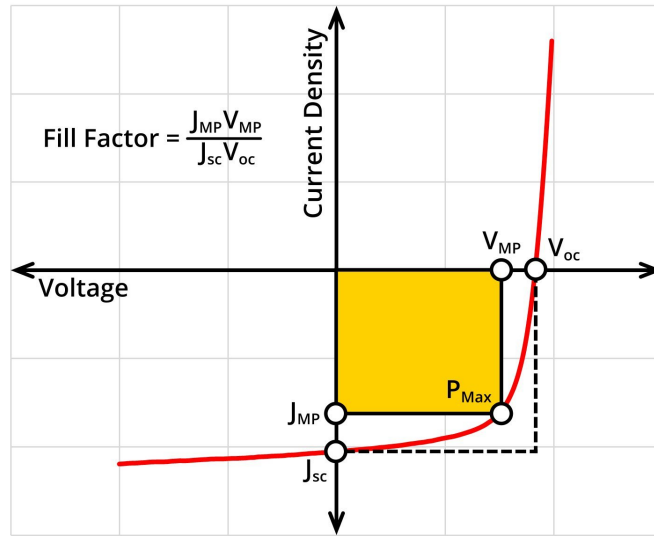


FIGURE D-1 – Exemple de caractéristique densité de courant - tension (ou caractéristique J-V) d'une cellule photovoltaïque (source: www.ossila.com/pages/solar-cells-theory).

Les quatre paramètres clés sont:

- le courant de court-circuit, J_{sc} , qui correspond au photocourant à polarisation nulle;
- la tension de circuit-ouvert, V_{oc} , qui correspond à la tension pour laquelle le photocourant devient nul;
- le facteur de forme (ou Fill Factor en anglais), FF , qui caractérise l'écart entre les caractéristiques J-V réelle et idéale (celle d'une diode). Il est défini par la relation:

$$FF = \frac{J_{MP} V_{MP}}{J_{sc} V_{oc}} \quad (D.1)$$

où J_{MP} et V_{MP} sont respectivement la densité de courant et la polarisation obtenues au point de puissance maximale délivrée par la cellule (P_{Max} sur la Figure D-1);

- l'efficacité, Eff , qui correspond au rapport entre la puissance maximale obtenue et la puissance lumineuse incidente P_{lum} .

$$Eff = \frac{P_{max}}{P_{lum}} = \frac{J_{sc} V_{oc} FF}{P_{lum}} \quad (D.2)$$

Bibliographie

- [1] M. A. Green, Y. Hishikawa, E. D. Dunlop, D. H. Levi, J. Hohl-Ebinger, and A. W. Ho-Baillie, “Solar cell efficiency tables (version 52),” *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, vol. 26, pp. 427–436, 2018.
- [2] J. Wallentin, N. Anttu, D. Asoli, M. Huffman, I. Åberg, M. H. Magnusson, G. Siefer, P. Fuss-Kailuweit, F. Dimroth, B. Witzigmann, H. Q. Xu, L. Samuelson, K. Deppert, and M. T. Borgström, “InP nanowire array solar cells achieving 13.8% efficiency by exceeding the ray optics limit,” *Science*, vol. 339, pp. 1057–1060, 2013.
- [3] L. Yu, S. Misra, J. Wang, S. Qian, M. Foldyna, J. Xu, Y. Shi, E. Johnson, and P. R. i. Cabarrocas, “Understanding light harvesting in radial junction amorphous silicon thin film solar cells,” *Scientific Reports*, vol. 4, p. 4357, 2014.
- [4] S. Qian, S. Misra, J. Lu, Z. Yu, L. Yu, J. Xu, J. Wang, L. Xu, Y. Shi, K. Chen, and P. Roca i Cabarrocas, “Full potential of radial junction si thin film solar cells with advanced junction materials and design,” *Applied Physics Letters*, vol. 107, p. 043902, 2015.
- [5] S. Misra, L. Yu, M. Foldyna, and P. Roca i Cabarrocas, “New approaches to improve the performance of thin-film radial junction solar cells built over silicon nanowire arrays,” *IEEE Journal of Photovoltaics*, vol. 5, pp. 40–45, 2015.
- [6] Zingway Pei, Shu-Tong Chang, Chang-Wei Liu, and Yi-Chan Chen, “Numerical simulation on the photovoltaic behavior of an amorphous-silicon nanowire-array solar cell,” *IEEE Electron Device Letters*, vol. 30, pp. 1305–1307, 2009.
- [7] D. Diouf, I. Ngo, J.-P. Kleider, M. Gueunier-Farret, and J. Alvarez, “Nanowire solar cells using hydrogenated amorphous silicon: A modeling study,” *physica status solidi (a)*, vol. 209, pp. 1026–1030, 2012.
- [8] M. Zanuccoli, I. Semenihin, J. Michallon, E. Sangiorgi, and C. Fiegna, “Advanced electro-optical simulation of nanowire-based solar cells,” *Journal of Computational Electronics*, vol. 12, no. 4, pp. 572–584, 2013.
- [9] M. D. Kelzenberg, M. C. Putnam, D. B. Turner-Evans, N. S. Lewis, and H. A. Atwater, “Predicted efficiency of si wire array solar cells,” in *Photovoltaic Specialists Conference (PVSC), 2009 34th IEEE*, pp. 001948–001953, IEEE, 2009.
- [10] Z. Lokar, B. Lipovsek, M. Topic, and J. Krc, “Performance analysis of rigorous coupled-wave analysis and its integration in a coupled modeling approach for optical simulation of complete heterojunction silicon solar cells,” *J. Beilstein J. Nanotechnol.*, vol. 9, p. 2315–2329, 2018.
- [11] R. L. Anderson, “Experiments on Ge-GaAs heterojunctions,” *Solid-State Electronics*, vol. 5, pp. 341–351, 1962.
- [12] H. Fujiwara and M. Kondo, “Effects of a-Si:H layer thicknesses on the performance of a-Si:H/c-Si heterojunction solar cells,” *Journal of Applied Physics*, vol. 101, p. 054516, 2007.

- [13] E. A. Davis and N. F. Mott, "Conduction in non-crystalline systems v. conductivity, optical absorption and photoconductivity in amorphous semiconductors," *Philosophical Magazine B*, vol. 22, p. 903, 1970.
- [14] M. J. Powell and S. C. Deane, "Improved defect-pool model for charged defects in amorphous silicon," *Physical Review B*, vol. 48, pp. 10815–10827, 1993.
- [15] J. P. Kleider, C. Longeaud, and M. E. Gueunier, "The modulated photocurrent technique: a powerful tool to investigate band gap states in silicon based thin films," *physica status solidi (c)*, vol. 1, pp. 1208–1226, 2004.
- [16] J. P. Kleider, Y. M. Soro, R. Chouffot, A. S. Gudovskikh, P. Roca i Cabarrocas, J. Damon-Lacoste, D. Eon, and R. P.-J., "High interfacial conductivity at amorphous silicon/crystalline silicon heterojunctions," *Journal of Non-Crystalline Solids*, vol. 354, pp. 2641–2645, 2008.
- [17] W. Favre, M. Labrune, F. Dadouche, A. S. Gudovskikh, P. Roca i Cabarrocas, and J. P. Kleider, "Study of the interfacial properties of amorphous silicon/n-type crystalline silicon heterojunction through static coplanar conductance measurements," *physica status solidi (c)*, vol. 7, pp. 1037–1040, 2010.
- [18] R. Street, "Hydrogenated amorphous silicon," *Cambridge University Press*, 1991.
- [19] H. Matsuura, T. Okuno, H. Okushi, and K. Tanaka, "Electrical properties of n-amorphous / p-crystalline silicon heterojunctions," vol. 55, pp. 1012–1019, 1984.
- [20] O. A. Maslova, J. Alvarez, E. V. Gushina, W. Favre, M. E. Gueunier-Farret, A. S. Gudovskikh, A. V. Ankudinov, E. I. Terukov, and J. P. Kleider, "Observation by conductive-probe atomic force microscopy of strongly inverted surface layers at the hydrogenated amorphous silicon/crystalline silicon heterojunctions," *Applied Physics Letters*, vol. 97, p. 252110, 2010.
- [21] J. P. Kleider, A. S. Gudovskikh, and P. Roca i Cabarrocas, "Determination of the conduction band offset between hydrogenated amorphous silicon and crystalline silicon from surface inversion layer conductance measurements," *Applied Physics Letters*, vol. 92, p. 162101, 2008.
- [22] J. Kleider, R. Chouffot, A. Gudovskikh, P. Roca i Cabarrocas, M. Labrune, P.-J. Ribeyron, and R. Brüggemann, "Electronic and structural properties of the amorphous/crystalline silicon interface," *Thin Solid Films*, vol. 517, pp. 6386–6391, 2009.
- [23] R. Varache, J. P. Kleider, W. Favre, and L. Korte, "Band bending and determination of band offsets in amorphous/crystalline silicon heterostructures from planar conductance measurements," *Journal of Applied Physics*, vol. 112, p. 123717, 2012.
- [24] R. Varache, W. Favre, L. Korte, and J. Kleider, "Influence of the amorphous/crystalline silicon heterostructure properties on planar conductance measurements," *Journal of Non-Crystalline Solids*, vol. 358, pp. 2236–2240, 2012.
- [25] M. Schmidt, L. Korte, A. Laades, R. Stangl, C. Schubert, H. Angermann, E. Conrad, and K. Maydell, "Physical aspects of a-Si:H/c-Si hetero-junction solar cells," *Thin Solid Films*, vol. 515, pp. 7475–7480, 2007.
- [26] L. Korte and M. Schmidt, "Doping type and thickness dependence of band offsets at the amorphous/crystalline silicon heterojunction," *Journal of Applied Physics*, vol. 109, p. 063714, 2011.
- [27] T. F. Schulze, L. Korte, F. Ruske, and B. Rech, "Band lineup in amorphous/crystalline silicon heterojunctions and the impact of hydrogen microstructure and topological disorder," *Physical Review B*, vol. 83, p. 165314, 2011.

- [28] R. Varache, M.-E. Gueunier-Farret, B. Halliop, N. P. Kherani, and J.-P. Kleider, "Influence of the undoped a-Si:H buffer layer on a-Si:H/c-Si heterojunctions from planar conductance and lifetime measurements," *27th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition*, pp. 1439–1442, 2012.
- [29] S. Perlman and D. L. Feucht, "Abrupt heterojunction emitters for transistors," *International Journal of Electronics*, vol. 18, p. 159, 1965.
- [30] A. Riben and D. L. Feucht, "Electrical transport in nGe-pGaAs heterojunctions," *International Journal of Electronics*, vol. 20, p. 583, 1966.
- [31] J. P. Donnelly and A. Milnes, "Current/voltage characteristics of p-n Ge-Si and Ge-GaAs heterojunctions," *Proceedings of the IEEE*, vol. 113, p. 1468, 1966.
- [32] R. H. Rediker, T. M. Quist, and B. Lax, "High speed heterojunction photodiodes and beam-of-light transistors," *Proceedings of the IEEE*, vol. 51, p. 218, 1963.
- [33] V. Smid, J. J. Mares, L. Stourac, and J. Kristofik, *Tetrahedrally-Bonded Amorphous Semiconductors*. edited by D. Adler and H. Fritzche (Plenum, New York), 1985.
- [34] F. Rubinelli, S. Albornoz, and R. Buitrago, "Amorphous-crystalline silicon heterojunction: Theoretical evaluation of the current terms," *Solid-State Electronics*, vol. 32, p. 813, 1989.
- [35] P. Li, Y. Li, and C. Salama, "A heterojunction bipolar transistor with a thin /spl alpha/-Si emitter," *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 41, pp. 932 – 935, 1994.
- [36] M. H. Brodsky, G. H. Dohler, and P. J. Steinhardt, "On the measurement of the conductivity density of states of evaporated amorphous silicon films," *physica status solidi (b)*, vol. 72, p. 761, 1975.
- [37] U. Das, S. Hegedus, L. Zhang, J. Appel, J. Rand, and R. Birkmire, "Investigation of hetero-interface and junction properties in silicon heterojunction solar cells," in *2010 35th IEEE Photovoltaic Specialists Conference*, pp. 001358–001362, IEEE, 2010.
- [38] R. V. K. Chavali, J. R. Wilcox, B. Ray, J. L. Gray, and M. A. Alam, "Correlated Nonideal Effects of Dark and Light I–V Characteristics in a-Si/c-Si Heterojunction Solar Cells," *IEEE Journal of Photovoltaics*, vol. 4, pp. 763–771, 2014.
- [39] L. F. Marsal, J. Pallarès, X. Correig, J. Calderer, and R. Alcubilla, "Electrical characterization of *n*-amorphous/ *p*-crystalline silicon heterojunctions," *Journal of Applied Physics*, vol. 79, pp. 8493–8497, 1996.
- [40] H. Matsuura, T. Okuno, H. Okushi, and K. Tanaka, "Electrical properties of *n*-amorphous/*p*-crystalline silicon heterojunctions," *Journal of Applied Physics*, vol. 55, pp. 1012–1019, 1984.
- [41] Y. J. Song, M. R. Park, E. Guliants, and W. A. Anderson, "Influence of defects and band offsets on carrier transport mechanisms in amorphous silicon/crystalline silicon heterojunction solar cells," *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 64, pp. 225–240, 2000.
- [42] T. F. Schulze, L. Korte, E. Conrad, M. Schmidt, and B. Rech, "Electrical transport mechanisms in a-Si:H/c-Si heterojunction solar cells," *Journal of Applied Physics*, vol. 107, p. 023711, 2010.
- [43] B. Jagannathan, W. Anderson, and J. Coleman, "Amorphous silicon/p-type crystalline silicon heterojunction solar cells," *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 46, pp. 289–310, 1997.
- [44] M. Mikolášek, M. Nemec, M. Vojs, J. Jakabovič, V. Řeháček, D. Zhang, M. Zeman, and L. Harmatha, "Electrical transport mechanisms in amorphous/crystalline silicon heterojunction: Impact of passivation layer thickness," *Thin Solid Films*, vol. 558, pp. 315–319, 2014.

- [45] H. Mimura and Y. Hatanaka, “Carrier transport mechanisms of p -type amorphous – n -type crystalline silicon heterojunctions,” *Journal of Applied Physics*, vol. 71, pp. 2315–2320, 1992.
- [46] N. Jensen, U. Rau, R. M. Hausner, S. Uppal, L. Oberbeck, R. B. Bergmann, and J. H. Werner, “Recombination mechanisms in amorphous silicon/crystalline silicon heterojunction solar cells,” *Journal of Applied Physics*, vol. 87, pp. 2639–2645, 2000.
- [47] V. A. Dao, Y. Lee, S. Kim, Y. Kim, N. Lakshminarayan, and J. Yi, “Interface Characterization and Electrical Transport Mechanisms in a-Si:H/c-Si Heterojunction Solar Cells,” *Journal of The Electrochemical Society*, vol. 158, p. H312, 2011.
- [48] M. Taguchi, E. Maruyama, and M. Tanaka, “Temperature Dependence of Amorphous/Crystalline Silicon Heterojunction Solar Cells,” *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 47, pp. 814–818, 2008.
- [49] M. Page, E. Iwaniczko, Y.-Q. Xu, L. Roybal, F. Hasoon, Q. Wang, and R. Crandall, “Amorphous/crystalline silicon heterojunction solar cells with varying i-layer thickness,” *Thin Solid Films*, vol. 519, pp. 4527–4530, 2011.
- [50] M. W. M. van Cleef, R. E. I. Schropp, and F. A. Rubinelli, “Significance of tunneling in $p+$ amorphous silicon carbide n crystalline silicon heterojunction solar cells,” *Applied Physics Letters*, vol. 73, p. 2609, 1998.
- [51] A. Kanevce and W. K. Metzger, “The role of amorphous silicon and tunneling in heterojunction with intrinsic thin layer (HIT) solar cells,” *Journal of Applied Physics*, vol. 105, p. 094507, 2009.
- [52] M. Rahmouni, A. Datta, P. Chatterjee, J. Damon-Lacoste, C. Ballif, and P. Roca i Cabarrocas, “Carrier transport and sensitivity issues in heterojunction with intrinsic thin layer solar cells on N -type crystalline silicon: A computer simulation study,” *Journal of Applied Physics*, vol. 107, p. 054521, 2010.
- [53] M. Mews, M. Liebhaber, B. Rech, and L. Korte, “Valence band alignment and hole transport in amorphous/crystalline silicon heterojunction solar cells,” *Applied Physics Letters*, vol. 107, p. 013902, 2015.
- [54] K. Ghosh, S. Bowden, and C. Tracy, “Role of hot carriers in the interfacial transport in amorphous silicon/crystalline silicon heterostructure solar cells,” *physica status solidi (a)*, vol. 210, pp. 413–419, 2013.
- [55] H. Schlangenotto, H. Maeder, and W. Gerlach, “Temperature dependence of the radiative recombination coefficient in silicon,” *physica status solidi (a)*, vol. 21, p. 357–367, 1974.
- [56] A. Richter, S. W. Glunz, F. Werner, J. Schmidt, and A. Cuevas, “Improved quantitative description of Auger recombination in crystalline silicon,” *Physical Review B*, vol. 86, p. 165202, 2012.
- [57] M. J. Kerr and A. Cuevas, “General parameterization of Auger recombination in crystalline silicon,” *Journal of Applied Physics*, vol. 91, p. 2473, 2002.
- [58] N. H. Thoan, M. Jivanescu, B. J. O’Sullivan, L. Pantisano, I. Gordon, V. V. Afanas’ev, and A. Stesmans, “Correlation between interface traps and paramagnetic defects in c-Si/a-Si:H heterojunctions,” *Applied Physics Letters*, vol. 100, p. 142101, 2012.
- [59] B. M. George, J. Behrends, A. Schnegg, T. F. Schulze, M. Fehr, L. Korte, B. Rech, K. Lips, M. Rohrmüller, E. Rauls, W. G. Schmidt, and U. Gerstmann, “Atomic Structure of Interface States in Silicon Heterojunction Solar Cells,” *Physical Review Letters*, vol. 110, p. 136803, 2013.

- [60] E. Simoen, V. Ferro, and B. J. O'Sullivan, "Deep-level transient spectroscopy of Al/a-Si:H/c-Si structures for heterojunction solar cell applications," *Journal of Applied Physics*, vol. 116, p. 234501, 2014.
- [61] J. Brody, A. Rohatgi, and A. Ristow, "Review and comparison of equations relating bulk lifetime and surface recombination velocity to effective lifetime measured under flash lamp illumination," *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 77, p. 293–3011, 2003.
- [62] S. Tardon, M. Rösch, R. Brüggemann, T. Unold, and G. Bauer, "Photoluminescence studies of a-Si:H/c-Si-heterojunction solar cells," *Journal of Non-Crystalline Solids*, vol. 338-340, pp. 444–447, 2004.
- [63] R. Brüggemann and S. Olibet, "Analysis of electroluminescence from silicon solar cells," *Energy Procedia*, vol. 2, pp. 19–26, 2010.
- [64] Y. Mada, "A nondestructive method for measuring the spatial distribution of minority carrier lifetime in silicon wafers," *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 18, p. 2171–2172, 1979.
- [65] G. Citarella, S. von Aichberger, and M. Kunst, "Microwave photoconductivity techniques for the characterization of semiconductors," *Materials Science and Engineering B*, vol. 91-92, p. 224–228, 2002.
- [66] O. Palais and A. Arcari, "Contactless measurement of bulk lifetime and surface recombination velocity in silicon wafers," *Journal of Applied Physics*, vol. 93, p. 4686–4690, 2003.
- [67] T. Otaredian, "Separate contactless measurement of the bulk lifetime and the surface recombination velocity by the harmonic optical generation of the excess carriers," *Solid-State Electronics*, vol. 36, pp. 153–162, 1993.
- [68] F. Sanii, F. P. Giles, R. J. Schwartz, and J. L. Gray, "Contactless nondestructive measurement of bulk and surface recombination using frequency-modulated free carrier absorption," *Solid-State Electronics*, vol. 35, pp. 311–317, 1992.
- [69] C. H. Wang and A. Neugroschel, "Minority-carrier lifetime and surface recombination velocity measurement by frequency-domain photoluminescence," *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 38, p. 2169, 1991.
- [70] R. Brüggemann and S. Reynolds, "Modulated photoluminescence studies for lifetime determination in amorphous-silicon passivated crystalline-silicon wafers," *Journal of Non-Crystalline Solids*, vol. 352, p. 1888–1891, 2006.
- [71] R. A. Sinton and A. Cuevas, "Contactless determination of current-voltage characteristics and minority-carrier lifetimes in semiconductors from quasi-steady-state photoconductance data," *Applied Physics Letters*, vol. 69, p. 2510, 1996.
- [72] A. Cuevas, R. Sinton, and M. Stuckings, "Determination of recombination parameters in semiconductors from photoconductance measurements," *Optoelectronic and Microelectronic Materials and Devices Proceedings*, 1996.
- [73] S. Elliot in *Physics of amorphous materials*, Longman, 1984.
- [74] H. Fritzsche, *Electronic Properties of Amorphous Semiconductors*. in Amorphous and liquid semiconductors, edited by J. Tauc (Plenum Press, London and New York), 1974.
- [75] M. Xu, *Photoluminescence techniques for the characterization of photovoltaic interfaces*. PhD thesis, Université Paris-Saclay, 2016.
- [76] E. Daub and P. Würfel, "Ultralow value of the absorption coefficient of si obtained from luminescence," *Physical Review Letters*, vol. 74, p. 1020–1023, 1995.

- [77] H. Oheda, “Phase-shift analysis of modulated photocurrent: Its application to the determination of the energetic distribution of gap states,” *Journal of Applied Physics*, vol. 52, p. 6693, 1981.
- [78] H. Oheda, S. Yamasaki, T. Yoshida, A. Matsuda, H. Okushi, and K. Tanaka, “Gap States Distribution of Undoped a-Si H Determined with Phase-Shift Analysis of the Modulated Photocurrent,” *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 21, pp. L440–L442, 1982.
- [79] R. Brüggemann, C. Main, J. Berkin, and S. Reynolds, “An evaluation of phase-shift analysis of modulated photocurrents,” *Philosophical Magazine B*, vol. 62, p. 29, 1990.
- [80] C. Longeaud and J. P. Kleider, “General analysis of the modulated-photocurrent experiment including the contributions of holes and electrons,” *Physical Review B*, vol. 45, p. 11672, 1992.
- [81] C. Longeaud and J. P. Kleider, “Trapping and recombination via dangling bonds in amorphous and glassy semiconductors under steady-state conditions: Application to the modulated photocurrent experiment,” *Physical Review B*, vol. 48, p. 8715, 1993.
- [82] R. Herberholz, T. Walter, and H. W. Schock, “Density of states in CuIn(SSe)₂ thin films from modulated photocurrent measurements,” *Journal of Applied Physics*, vol. 76, p. 2904, 1994.
- [83] A. Krysztopa, M. Igalsen, Y. Aida, J. K. Larsen, L. Guetay, and S. Siebentritt, “Defect levels in the epitaxial and polycrystalline CuGaSe₂ by photocurrent and capacitance methods,” *Journal of Applied Physics*, vol. 110, p. 103711, 2011.
- [84] B. H. Hamadani, J. Roller, P. Kounavis, N. B. Zhitenev, and D. J. Gundlach, “Modulated photocurrent spectroscopy of CdTe/CdS solar cells—equivalent circuit analysis,” *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 116, p. 126, 2013.
- [85] J. Luckas, A. Piarristeguy, G. Bruns, P. Jost, S. Grothe, R. M. Schmidt, C. Longeaud, and M. Wuttig, “Stoichiometry dependence of resistance drift phenomena in amorphous GeSnTe phase-change alloys,” *Journal of Applied Physics*, vol. 113, p. 023704, 2013.
- [86] C. Longeaud, J. Luckas, D. Krebs, R. Carius, J. Klomfass, and M. Wuttig, “On the density of states of germanium telluride,” *Journal of Applied Physics*, vol. 112, p. 113714, 2012.
- [87] P. T. Erslev, H. Y. Chen, J. Gao, M. C. Beard, A. J. Frank, J. van de Lagemaat, J. C. Johnson, and J. M. Luther, “Sharp exponential band tails in highly disordered lead sulfide quantum dot arrays,” *Physical Review B*, vol. 86, p. 155313, 2012.
- [88] A. Darga, D. Mencaraglia, C. Longeaud, T. J. Savenije, B. O’Regan, S. Bourdais, T. Muto, B. Delatouche, and G. Dennler, “On charge carrier recombination in Sb₂S₃ and its implication for the performance of solar cells,” *Journal of Physical Chemistry C*, vol. 117, p. 20525, 2013.
- [89] S. Gorgolis, A. Giannopoulou, and P. Kounavis, “Charge carriers’ trapping states in pentacene films studied by modulated photocurrent,” *Journal of Applied Physics*, vol. 113, p. 123102, 2013.
- [90] N. Vagenas, A. Giannopoulou, and P. Kounavis, “Density and mobility effects of the majority carriers in organic semiconductors under light excitation,” *Journal of Applied Physics*, vol. 117, p. 033105, 2015.
- [91] M. Gueunier, C. Longeaud, and J. Kleider, “Modulated photocurrent to characterize the density of states of thin film semiconductors in the recombination regime,” *The European Physical Journal Applied Physics*, vol. 26, pp. 75–85, 2004.
- [92] “Atlas user’s manual,” 2016.

- [93] D. Reaux, *Cellules photovoltaïques à hétérojonctions de silicium (a-Si:H/c-Si) : modélisation des défauts et de la recombinaison à l'interface*. PhD thesis, Université Paris-Saclay, 2017.
- [94] D. Deligiannis, V. Marioleas, R. Vasudevan, C. C. G. Visser, R. A. C. M. M. van Swaaij, and M. Zeman, "Understanding the thickness-dependent effective lifetime of crystalline silicon passivated with a thin layer of intrinsic hydrogenated amorphous silicon using a nanometer-accurate wet-etching method," *Journal of Applied Physics*, vol. 119, p. 235307, 2016.
- [95] "https://les-electroniciens.com/sites/default/files/cours/transistor_mos_et_amplificateurs.pdf."
- [96] M. Bail, M. Schulz, and R. Brendel, "Space-charge region-dominated steady-state photoconductance in low-lifetime si wafers," *Applied Physics Letters*, vol. 82, p. 757–759, 2003.
- [97] P. J. Cousins, D. H. Neuhaus, and J. E. Cotter, "Experimental verification of the effect of depletion-region modulation on photoconductance lifetime measurements," *Journal of Applied Physics*, vol. 95, p. 1854–1858, 2004.
- [98] D. Macdonald and A. Cuevas, "Trapping of minority carriers in multicrystalline silicon," *Applied Physics Letters*, vol. 74, p. 1710–1712, 1999.
- [99] R. R. Koropecski, J. A. Schmidt, and R. Arce, "Density of states in the gap of amorphous semiconductors determined from modulated photocurrent measurements in the recombination regime," *Journal of Applied Physics*, vol. 91, p. 8965, 2002.
- [100] A. Levchenko, R. Lachaume, J. Michallon, S. Collin, J. Alvarez, S. Le Gall, Z. Djebbour, and J.-P. Kleider, "Coupling optical and electrical modelling for the study of a-Si:H-based nanowire array solar cells," *physica status solidi (c)*, vol. 14, p. 1700181, 2017.
- [101] A. Levchenko, S. Le Gall, R. Lachaume, J. Michallon, S. Collin, J. Alvarez, Z. Djebbour, and J.-P. Kleider, "Optoelectrical modeling of solar cells based on c-Si/a-Si:H nanowire arrays: focus on the electrical transport in between the nanowires," *Nanotechnology*, vol. 29, p. 255401, 2018.
- [102] S. Misra, L. Yu, M. Foldyna, and P. Roca i Cabarrocas, "High efficiency and stable hydrogenated amorphous silicon radial junction solar cells built on VLS-grown silicon nanowires," *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 118, pp. 90–95, 2013.
- [103] J. Michallon, *Étude et optimisation de l'absorption optique et du transport électronique dans les cellules photovoltaïques à base de nanofils*. PhD thesis, Université Grenoble Alpes, 2015.
- [104] J. Hugonin and P. Lalanne, *Reticolo software for grating analysis*. Institut d'Optique, Palaiseau, France, 2005.
- [105] R. Lachaume, *Contribution to the electrical characterization and to the numerical simulation of the silicon heterojunction solar cells*. PhD thesis, Université Grenoble Alpes, 2014.
- [106] Y. Park, V. Choong, Y. Gao, B. Hsieh, and C. Tang, "Work function of indium tin oxide transparent conductor measured by photoelectron spectroscopy," *Applied Physics Letters*, vol. 68, pp. 2699–2701, 1996.

Communications de l'auteure

Articles dans une revue

- Alexandra Levtschenko, Sylvain Le Gall, Raphaël Lachaume, Jérôme Michallon, Stéphane Collin, José Alvarez, Zakaria Djebbour and Jean-Paul Kleider, "Optoelectrical modeling of solar cells based on c-Si/a-Si:H nanowire arrays: focus on the electrical transport in between the nanowires", *Nanotechnology*, 29 (25), p.255401, 2018.

- Alexandra Levtschenko, Raphaël Lachaume, Jérôme Michallon, Stéphane Collin, José Alvarez, Sylvain Le Gall, Zakaria Djebbour and Jean-Paul Kleider, "Coupling Optical and Electrical Modelling for the study of a-Si:H-based nanowire Array Solar Cells", *physica status solidi (c)*, 14, p.1700181, 2017.

Communications dans un congrès

- Alexandra Levtschenko, Rudolf Brüggemann, Hrachya Kyureghian, Alexandre Jaffré, Aurore Brézard-Oudot, Sylvain Le Gall, Zakaria Djebbour and Jean-Paul Kleider, "Modulated photocurrent and photoluminescence for the characterization of silicon heterojunctions: experiments and simulation", E-MRS 2018 Spring Meeting, Jun 2018, Strasbourg, France.

- Alexandra Levtschenko, Raphaël Lachaume, Jérôme Michallon, Stéphane Collin, José Alvarez, Sylvain Le Gall, Zakaria Djebbour and Jean-Paul Kleider, "Influence of electrical transport properties on performance of Si nanowire array solar cells assessed by optoelectrical modeling", E-MRS 2017 Spring Meeting, May 2017, Strasbourg, France.

- Alexandra Levtschenko, Raphaël Lachaume, Jean-Paul Kleider, José Alvarez, Sana Laribi and Sylvain Le Gall, "Simulation électrique et optique de nanofils de Silicium en géométrie radiale pour des applications photovoltaïques", Journées Nationales du Photovoltaïque 2015 (JNPV 2015), Dec 2015, Dourdan, France.

Posters

- Alexandra Levtschenko, Raphaël Lachaume, Rudolf Brüggemann, Hrachya Kyureghian, Alexandre Jaffré, Aurore Brézard-Oudot, Sylvain Le Gall, Zakaria Djebbour and Jean-Paul Kleider, "Application de la technique de photocourant modulé (MPC) aux cellules à hétérojonctions c-Si/a-Si:H", Journées Nationales du Photovoltaïque 2017, Dec 2017 (JNPV 2017), Dourdan, France.

- Alexandra Levtschenko, Raphaël Lachaume, Jérôme Michallon, Stéphane Collin, José Alvarez, Sylvain Le Gall, Zakaria Djebbour and Jean-Paul Kleider, "Couplage des modélisations électriques/optiques pour l'étude de cellules à base de nanofils a-Si:H", Journées Nationales du Photovoltaïque 2017 (JNPV 2017), Dec 2017, Dourdan, France.

- Alexandra Levtschenko, Aurore Brézard-Oudot, Alexandre Jaffré, José Alvarez, Artem Baranov, Ivan Morozov, Dmitry Kudryashov, Alexander Gudovskikh, Sylvain Le Gall, Zakaria Djebbour and Jean-Paul Kleider, "Etude des propriétés photoélectriques de couches de GaP déposées à basse température par des mesures de conductivité et de photocourant modulé", Journées Nationales du Photovoltaïque (JNPV 2016), Nov 2016, Dourdan, France.

Titre: Étude de dispositifs photovoltaïques à hétérojonctions a-Si:H/c-Si : caractérisations *vs.* simulations en régime modulé de structures planaires et modélisations optoélectroniques de nanofils à structure radiale.

Mots clés: photovoltaïque, caractérisation, simulation, nanofils, photocourant modulé, photoluminescence modulée, hétérojonction.

Résumé: Dans le contexte de la recherche sur l'amélioration des performances et la réduction des coûts des cellules solaires à base de silicium, nous nous sommes intéressés dans cette thèse aux hétérojonctions entre le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) et le silicium cristallin (c-Si). Nous avons étudié d'une part l'application de la technique de mesure du PhotoCourant Modulé (MPC) comme outil de caractérisation de l'interface a-Si:H/c-Si et que nous avons couplé à la technique de mesure de PhotoLuminescence Modulée (MPL) déjà largement utilisée pour étudier la qualité de passivation de l'interface. Nous avons alors caractérisé par ces deux techniques une série d'échantillons composées de (p)a-Si:H/(i)a-Si:H/(n)c-Si d'épaisseur de (i)a-Si:H allant de 2

à 50 nm. Une partie importante de cette étude a été réalisée par simulations numériques en 2D afin d'interpréter nos résultats expérimentaux. Une cohérence dans l'estimation de la densité d'état de défauts à l'interface a-Si:H/c-Si a été obtenue par les deux techniques.

Nous avons conçu d'autre part un outil de couplage des simulations électriques et optiques pour le design de cellules à base de nanofils à hétérojonction. Grâce à cet outil nous avons réalisé une étude plus réaliste et plus complète qu'auparavant où ces deux simulations étaient effectuées de manière séparée. Nous montrons notamment comment les conditions sur les contacts électriques des nanofils affectent les performances de la cellule solaire.

Title: Study of photovoltaic devices based on a-Si:H/c-Si heterojunctions: characterizations *vs.* simulations in modulated regime of planar structures and optoelectrical modeling of radial nanowires.

Keywords: photovoltaics, characterization, modeling, nanowires, modulated photocurrent, modulated photoluminescence, heterojunction.

Abstract: In the context of the research on improving performances and reducing costs of silicon-based solar cells, we focused on heterojunctions between hydrogenated amorphous silicon (a-Si:H) and crystalline silicon (c-Si). On the one hand, we studied the application of the Modulated PhotoCurrent technique (MPC) as a tool for characterizing the a-Si:H/c-Si interface and which we coupled to the Modulated PhotoLuminescence technique (MPL) widely used to study the quality of interface passivation. We characterized by these two techniques a serie of samples composed of (p)a-Si:H/(i)a-Si:H/(n)c-Si with a thickness of (i)a-Si:H going from 2 to 50 nm. An important part of this study was made by 2D numerical simulations

in order to interpret our experimental results. We showed that both techniques give the same estimation of the density of interface defects between (i)a-Si:H and (n)c-Si.

On the other hand, we developped a tool for coupling electrical and optical simulations for the design of nanowire-based solar cells with a radial heterojunction. Formerly, these simulations were most of the time performed separately and therefore were not allowing for a complete study of these kind of structures. We then made a study showing how the conditions of electrical contacts of nanowires affect the performances of these solar cells.