

Modélisation et simulation des cellules solaires à puits quantique à base de SiGe/Si

A.Aissat^{1,2}, F.Benyettou², J.P.Vilcot³

¹Laboratory LATSI Faculty of Technology University of Blida.1, 09000 Blida, Algeria

²Laboratory LASICOM Faculty of Sciences University of Blida.1, 09000 Blida, Algeria

³Institut d'Electronique, de Micro'lectronique et de Nanotechnologie (IEMN), UMR CNRS 8520, Université' des Sciences et Technologies de Lille 1, Avenue Poincare', BP 60069, 59652 Villeneuve d'Ascq, France

Résumé

Dans les dernières années, le développement des cellules solaires à puits quantiques QWSCs (Quantum Well Solar Cells) a généré un grand intérêt. Ces configurations ont montré une bonne promesse pour optimiser le rendement de conversion faible des cellules solaires conventionnelles à cause du taux élevé des pertes d'absorption présentes dans celles-ci [1]. Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à la modélisation et simulation de deux structures différentes de cellules solaires : une cellule solaire simple à base de silicium Si et une cellule solaire à puits quantique SiGe/Si. Quand on compare une cellule solaire à 80 couches de puits quantiques de $\text{Si}_{0,8}\text{Ge}_{0,2}$ avec une cellule solaire pin à base de Si, le courant de court circuit J_{cc} augmente de 23,55 à 37,48 mA/cm^2 avec un accroissement relatif trouvé de 59,15 %. En addition, la limite de la bande d'absorption des photons moindre énergie prolonge de 1100 nm jusqu'à 2000 nm.

Mot-clé: puits quantique; cellule solaire pin; rendement de conversion; modélisation

I. INTRODUCTION

Une conversion photovoltaïque efficace nécessite d'absorber le maximum du spectre solaire par la cellule photovoltaïque. Pour les cellules solaires au Silicium, le taux de pertes dues aux photons moins énergétiques que le gap et à l'énergie excédentaire des photons sont évalués à environ 23,5% et 33% [2]. Dans les dernières années, les cellules solaires nanostructures comme les cellules solaires à puits quantique sont les premières proposées comme des approches alternatives aux cellules solaires multi bandes. D'une façon simple, les cellules solaires à puits quantiques QWSC sont des cellules solaires conventionnelles pin incorporées par des couches ultraminces d'un matériau semi-conducteur d'une petite bande interdite (matériau puits quantique) à l'intérieur de la zone intrinsèque, séparées par des couches d'un matériau semi-conducteur d'une grande bande interdite (matériau barrière). Une telle structure permet le confinement des photo porteurs absorbés dans les puits quantiques, tout en générant un courant amélioré d'une part, et l'extension du spectre d'absorption vers les basses énergies tout en améliorant la réponse spectrale de la cellule solaire conventionnelle d'autre part. Par conséquent, les cellules solaires à puits quantiques offrent un rendement optimal. Depuis la découverte de cette idée par Burnham et son équipe dans la années 1990, l'étude des QWSC attire l'intérêt du monde entier de la recherche [3], [4]. Actuellement, dans le marché du photovoltaïque, le Silicium reste le matériau le moins cher et le plus utilisé pour la fabrication des cellules solaires,

malgré son rendement faible par rapport à d'autres nouveaux matériaux comme le InGaN, InGaAs, InAsN...etc. Par conséquent, il est important d'optimiser les performances des cellules solaires à base de Si, et donc la recherche des matériaux semi-conducteurs pour les implémenter comme des matériaux à puits quantique dans le Silicium est une belle option. Le SiGe est parmi les nouveaux matériaux qui gagnent une importance dans le domaine de l'optoélectronique actuellement. Grâce à ses propriétés physiques attrayantes et ses domaines d'utilisation diversifiés le SiGe devient un matériau favorable pour les puits quantiques dans le but d'améliorer le rendement des cellules solaires au Silicium. Les nanostructures SiGe/Si montrent un spectre d'absorption optimisé en le comparant avec les cellules solaires conventionnelles de Si [5,6]. Le choix de SiGe/Si est basé sur la recherche extensive sur cet alliage de type IV [7,8]. La Fig.1 montre le diagramme de bande d'énergie d'une cellule solaire hétérojonctions à puits quantiques SiGe/Si de type II [7]. La discontinuité de la bande de conduction est très petite de l'ordre de quelques meV. Dans la présente étude, nous nous sommes intéressés à la modélisation et simulation de deux différentes structures de cellule solaire ; les cellules solaire pin au Silicium et les cellules solaires à puits quantique $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ respectivement, afin de voir l'effet de l'introduction des puits quantiques $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ sur les paramètres caractéristiques et la réponse spectrale d'une cellule solaire au Silicium..

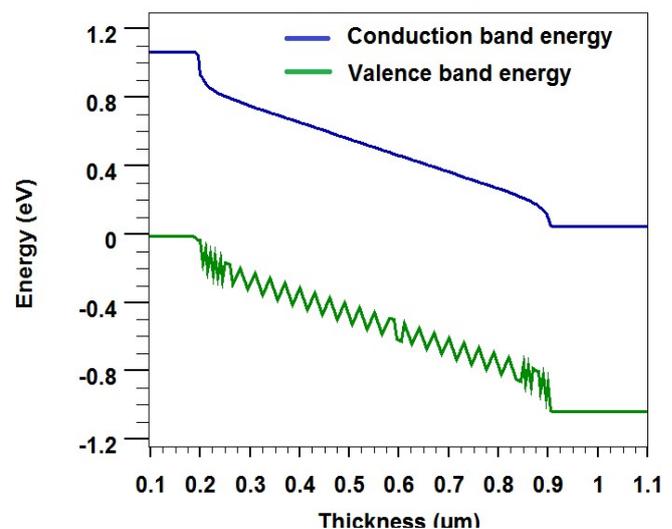


Fig.1. Diagramme de bande d'énergie de SiGe/Si.

II. STRUCTURE PIN DE LA CELLULE SOLAIRE

La structure pin de la cellule solaire au en total comme le montre la Fig.2. Une Couche de type p en avant qui est l'émetteur, une couche intrinsèque en milieu et une couche de type n en arrière qui est la base, le tout croissant sur un substrat de Silicium de type n de résistivité $0,05 \Omega \cdot \text{cm}$.

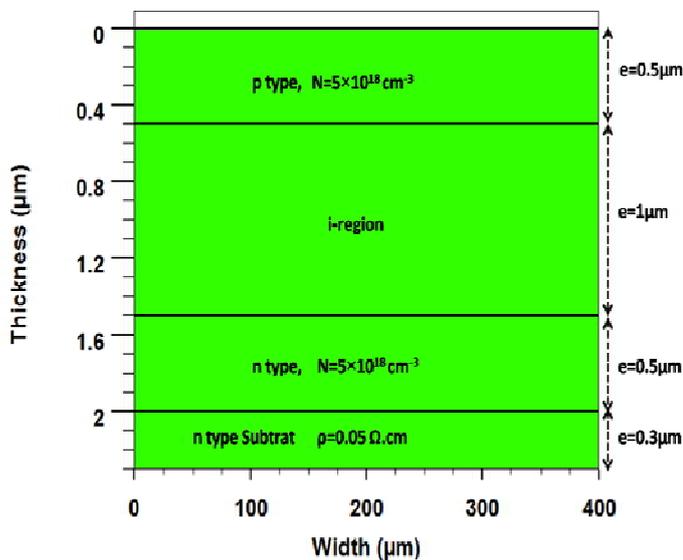


Fig.2. Structure de la cellule solaire pin à base de Silicium.

III. MODELISATION D'UNE CELLULE SOLAIRE A PUIITS QUANTIQUES SiGe/Si

Les puits quantiques de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ sont insérés à l'intérieur de la région intrinsèque de la structure pin présentée précédemment, tout en obtenant des périodes de puits quantique $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$. La région de QWs est séparée en haut et en bas par des couches tampons comme le montre la Fig.3, dans le but d'adapter la discordance du paramètre de maille entre la couche active et le substrat [9]. Tous les modèles physiques et les paramètres des matériaux utilisés dans ce travail sont décrits dans les appendices A et B respectivement.

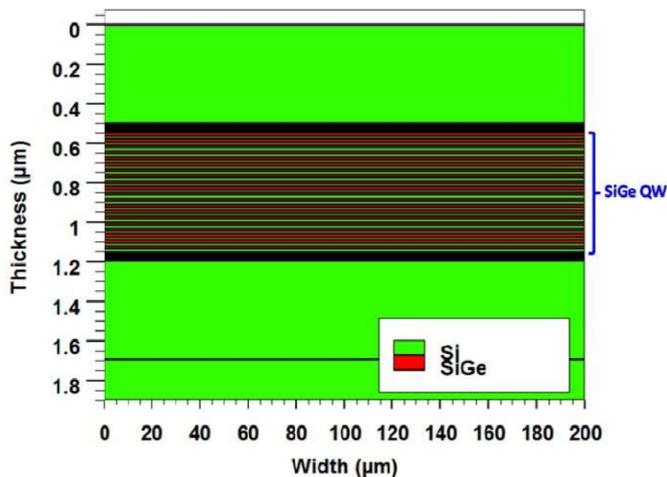


Fig.3. Structure de la cellule solaire à puits quantiques SiGe/Si.

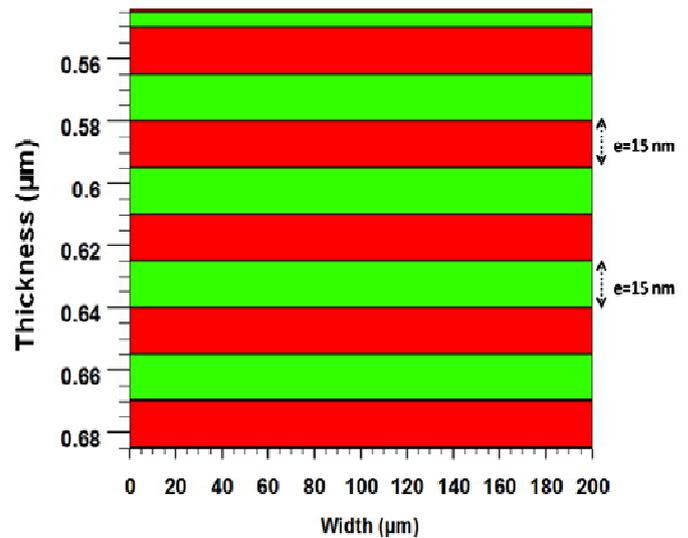


Fig.4. Dimensions des puits quantique et la couche barrière.

IV. RESULTATS ET DISCUSSION

Tout au long de ce travail, on utilise les conditions standards de qualification des cellules solaires : AM1,5 et une température de $300 \text{ }^\circ\text{K}$. On commence la simulation d'une cellule solaire pin présentée dans la Fig.2. Par la suite on passe à la simulation d'une cellule solaire à puits quantiques $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ pour un nombre de couches de puits quantiques variable : 30, 50, 60, et 80 respectivement et $x=20\%$. En plus, on étudie l'effet de la variation de la composition chimique de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$; $x=1\%$, 10% , 15% et 20% respectivement. Pour chaque simulation, les caractéristiques $I(V)$, $P(V)$, le rendement quantique externe

EQE (External Quantum Efficiency), et les paramètres caractéristiques importants d'une cellule solaire sont présentés et discutés. La Fig.5 représente le coefficient d'absorption du Silicium Si et $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ en fonction de la longueur d'onde. On voit clairement que le $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ exploite une plus grande partie du spectre solaire incident que le Silicium Si, surtout dans la gamme des longueurs d'ondes comprise entre $\sim 0,4-0,7 \mu\text{m}$. Ceci est dû au nombre d'états d'énergie élevés présents dans les puits quantiques $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ qui permet d'absorber un grand nombre de photons incidents.

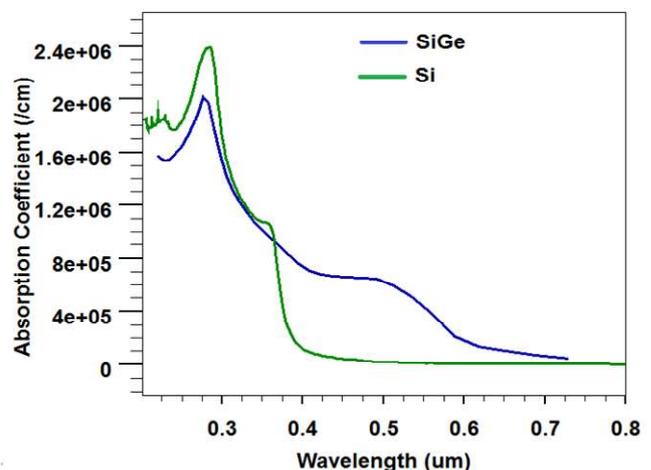


Fig.5. le coefficient d'absorption de GaAs et SiGe.

I. Effet de la variation du nombre de couche de puits quantique :

A. Caractéristiques $J(V)$ et $P(V)$

Les Fig.6 and Fig.7 expriment les caractéristiques $J(V)$ et $P(V)$ d'une cellule solaire pin. Il est clair que la cellule solaire pin à base de Silicium offre un courant de court circuit de $23,55 \text{ mA/cm}^2$, une tension de circuit ouvert de $0,53 \text{ V}$ et une puissance maximale de $10,08 \text{ mW/cm}^2$.

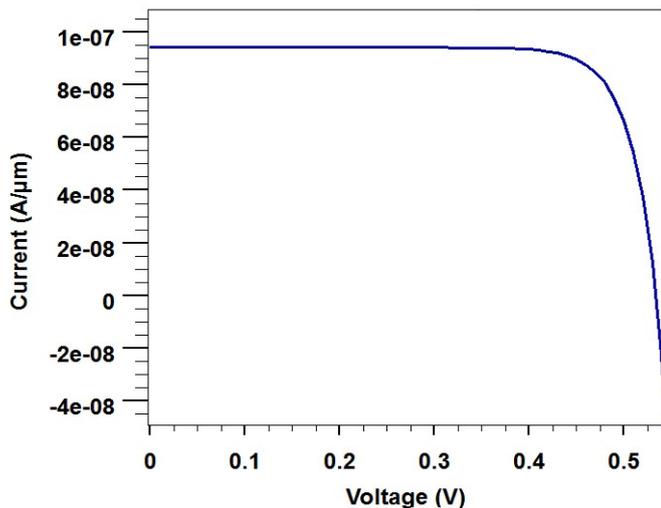


Fig.6. $J(V)$ de la cellule solaire pin.

La Fig.8 représente le $J(V)$ de la cellule solaire à puits quantique $\text{Si}_{0,8}\text{Ge}_{0,2}/\text{Si}$ pour un nombre de puits variable : 30, 50, 60 et 80 respectivement. Comme on peut le voir, le courant de court circuit augmente avec l'accroissement du nombre de couches de puits quantique, qui est dû aux paires électrons-trous supplémentaires absorbées par les puits quantiques de SiGe. La tension de circuit ouvert reste presque inchangée. Une augmentation relative de 59,15 % du courant de court circuit est obtenue en comparant une cellule solaire à puits quantique de 80 couches de puits avec une cellule solaire pin.

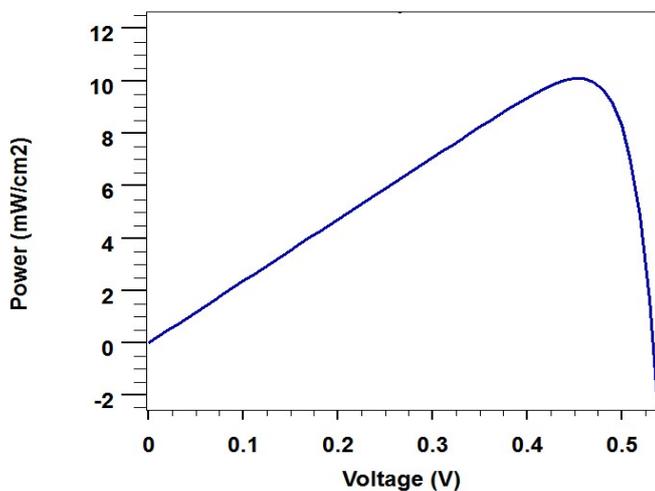


Fig.7. $P(V)$ de la cellule solaire pin.

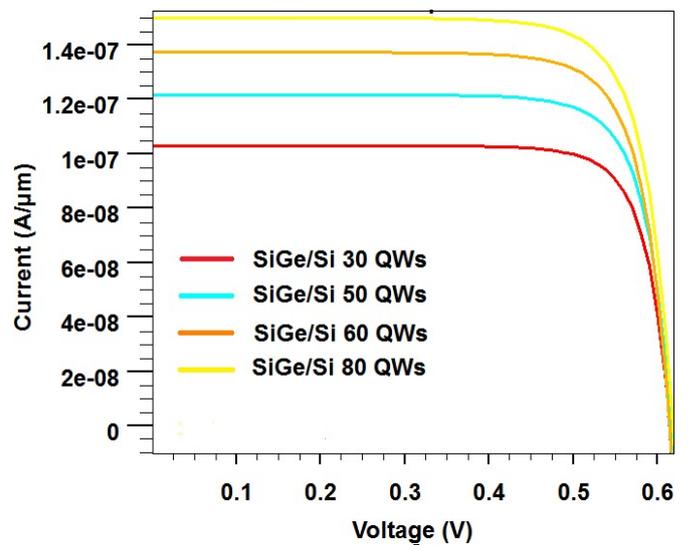


Fig.8. $J(V)$ de la cellule solaire à puits quantiques $\text{Si}_{0,8}\text{Ge}_{0,2}/\text{Si}$ (nombre de couche de puits= 30, 50, 60 et 80).

La Fig.9 représente le $P(V)$ de la cellule solaire à puits quantiques de $\text{Si}_{0,8}\text{Ge}_{0,2}/\text{Si}$ pour un nombre de puits variable : 30, 50, 60 et 80 respectivement. Il est clair que la puissance et donc le rendement de conversion de la cellule augmente avec le nombre de couches de puits quantiques. Une augmentation relative du rendement de 80% a été obtenue en comparant une cellule solaire à puits quantiques de 80 couches de puits avec une cellule solaire pin.

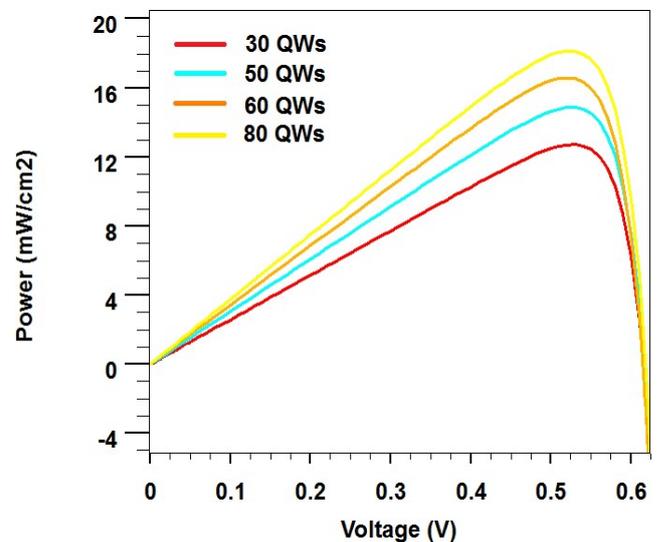


Fig.9. $P(V)$ de la cellule solaire à puits quantiques $\text{Si}_{0,8}\text{Ge}_{0,2}/\text{Si}$ (nombre de couche de puits= 30, 50, 60 et 80).

Le tableau 1 rassemble tout les paramètres caractéristiques (J_{cc} , V_{co} , FF, η) d'une cellule solaire pin avec puits quantique pour un nombre de couche égal à 30, 50, 60 et 80.

Table 1. Les paramètres caractéristiques d'une cellule solaire pin et à puits quantiques $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ /Si pour un nombre de couches de puits différents.

Nombre de couche	Jcc (mA/cm ²)	Vco (V)	FF (%)	η (%)
0	23,55	0,53	80,75	10,08
30	25,72	0,623	79,32	12,71
50	30,42	0,622	78,53	14,86
60	34,32	0,621	77,80	16,58
80	37,48	0,62	76,82	18,14

À partir du tableau 1, on remarque que le courant de court circuit et le rendement de conversion augmentent quand on insère plus de puits quantique à l'intérieur de la zone intrinsèque, jusqu'à 80 couches où on atteint la saturation.

B. Rendement Quantique Externe (External Quantum Efficiency EQE)

Dans l'introduction, on a dit que le but le plus important d'utilisation des cellules solaires à puits quantiques est bien d'aider les photons moins énergétiques (grandes longueurs d'onde) à être absorbés et donc participer à la génération du courant fournie par la cellule. Pour les cellules solaires pin à base de Si, la longueur d'onde maximale qui peut être absorbée est autour de 1100 nm. Avec l'insertion des puits quantiques ($\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$) à l'intérieur de la zone intrinsèque d'une cellule solaire pin à base de Si, les longueurs d'ondes comprises entre 1100 nm et 2000 nm peuvent être aussi absorbées. La Fig.10 représente le rendement quantique externe d'une cellule solaire sans et avec puits quantiques de $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ pour un nombre de couches de puits quantique variable de 30,50, 60 et 80 couches respectivement.

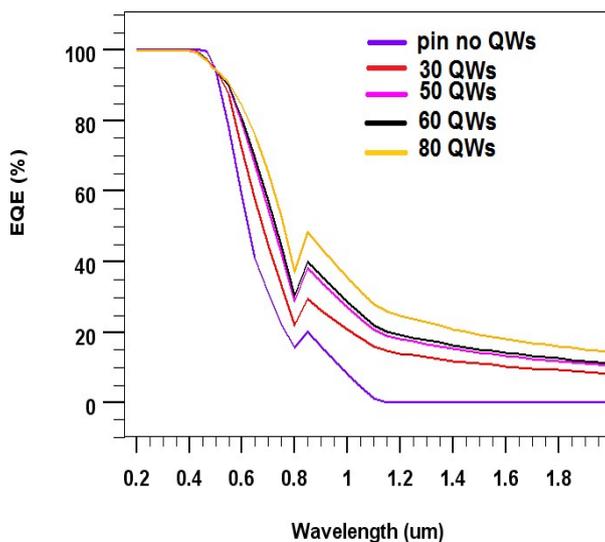


Fig.10. Rendement quantique externe EQE de la cellule solaire à puits quantiques $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ /Si pour un nombre de couche de puits quantiques variable 30, 50, 60 et 80.

Il est clair sur la Fig.10 que l'EQE d'une cellule solaire pin tend vers zéro autour de la longueur d'onde 1100 nm. D'autre part, le EQE d'une cellule solaire à puits quantiques dans la gamme des longueurs d'ondes 1100-2000nm avec un nombre de

couches égal à 30, 50, 60 et 80, varie de 11 jusqu'à 20%, ce qui signifie que les photons de cette gamme sont effectivement absorbés et ne sont pas perdus et donc contribuent à la génération des paires électrons-trous. En plus, on peut remarquer une autre optimisation dans la gamme des longueurs d'ondes comprises entre 600 et 1100 nm. On peut expliquer ce résultat par l'élargissement de l'épaisseur de la zone intrinsèque de la cellule solaire pin du à l'introduction des puits quantiques.

II. Effet de la variation de la composition chimique de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$

Dans cette section on fixe le nombre de couches de puits quantiques à 80 et on essaye de varier la composition chimique x du matériau utilisé pour les puits quantiques $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ afin de voir son influence sur les performances de la cellule solaire.

C. Caractéristiques $J(V)$ et $P(V)$

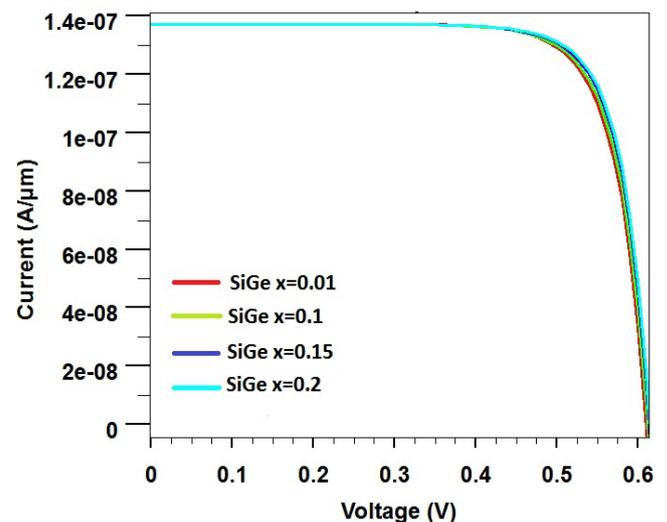


Fig.11. $J(V)$ de la cellule solaire à puits quantique $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (composition chimique $x= 1\%$, 10% , 15% et 20%).

La Fig.11 représente le $J(V)$ de la cellule solaire à puits quantique $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ /Si pour une composition chimique variable ; $x= 1\%$, 10% , 15% et 20% respectivement. On voit clairement que le courant de court circuit et la tension de circuit ouvert augmentent légèrement avec la composition chimique. Une composition chimique de 20% donne un meilleur courant de court circuit et un rendement de conversion optimal de 34,325 mA/cm² et 18,14% respectivement.

D. Rendement Quantique Externe (External Quantum Efficiency EQE)

La Fig.12 représente le rendement quantique externe d'une cellule solaire avec puits quantiques $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ /Si pour une composition chimique variable ; $x= 1\%$, 10% , 15% , 20% , 50% et 90% respectivement. A partir des Fig.12 et Fig.13, on observe que le rendement quantique externe atteint des valeurs maximales pour une composition chimique comprise entre 1% et 20%, avec un léger accroissement et il commence à décroître au-delà de la composition chimique $x=20\%$, à cause de l'augmentation de la discordance du paramètre de maille entre le matériau barrière qui est le Silicium et le matériau du puits

quantiques qui est le SiGe. Ce qui influe d'une façon néfaste sur la courbe de la réponse spectrale de la cellule solaire.

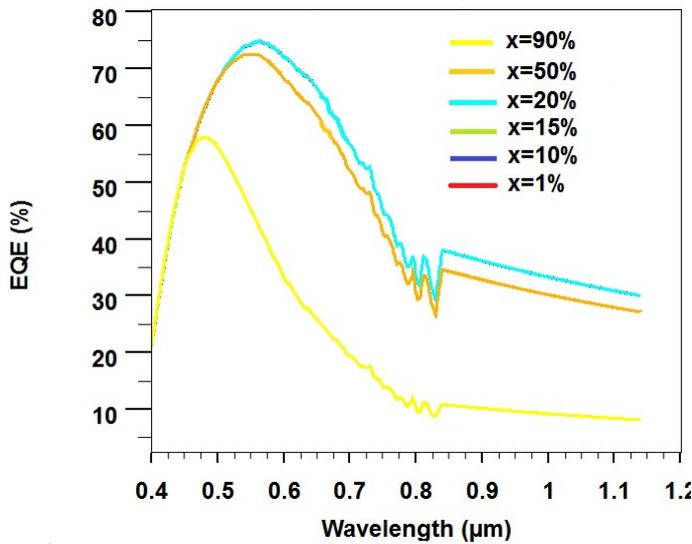


Fig.12. Rendement quantique externe RQE de la cellule solaire à puits quantiques Si_{1-x}Ge_x/Si pour une composition chimique variable 1%, 10%, 15%, 20%, 50 % et 90%.

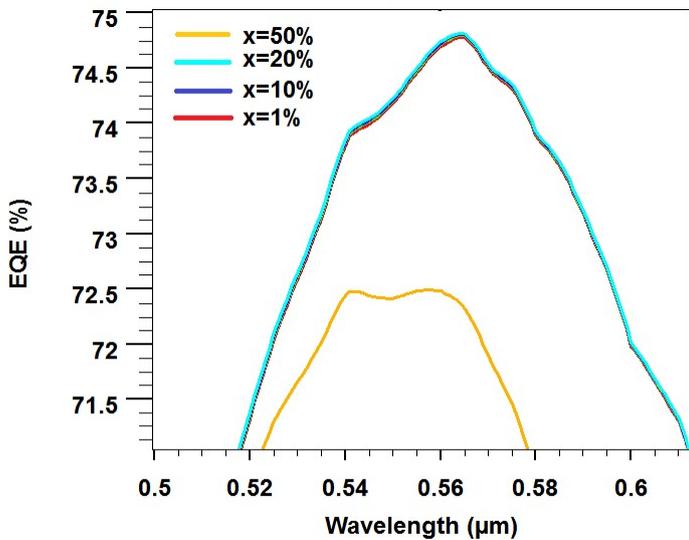


Fig.13. Zoom de la Fig.12

V. CONCLUSION

Dans le présent travail, on a étudié l'influence de l'introduction des puits quantiques de Si_{1-x}Ge_x à l'intérieur de la région intrinsèque d'une cellule solaire pin à base de silicium sur le perfectionnement des ses paramètres caractéristiques. Après la simulation, on a obtenu plusieurs résultats comme suivant. Premièrement, l'insertion de 80 couches de Si_{0,8}Ge_{0,2} améliore le rendement de conversion de 80%. Deuxièmement, l'insertion de même nombre de couches de Si_{0,8}Ge_{0,2} peut élargir la limite maximale du spectre d'absorption d'une cellule solaire pin à base de Silicium de 1100 nm vers 2000 nm. Finalement, une

composition chimique de 20% de Si_{1-x}Ge_x utilisé comme un matériau de puits quantique donne un rendement de conversion optimal de 18,14%.

Annexe A: Modèles physique utilisés

La partie suivante décrit les modèles physiques utilisés pour cette simulation:

1. Low Field Mobility models est utilisé pour le calcul de la mobilité en fonction de la température et il est donné par la relation suivante:

$$\mu_n(T_L) = \mu_{n0} \left(\frac{T_L}{300} \right)^{TMUN} \tag{1}$$

$$\mu_p(T_L) = \mu_{p0} \left(\frac{T_L}{300} \right)^{TMUN} \tag{2}$$

2. Concentration dependent model est utilisée pour le calcul de la mobilité en fonction du dopage et il est donné par [10]:

$$\mu_n = \mu_{nmin} \exp\left(\frac{-P_{c,n}}{ND}\right) + \frac{(\mu_{nmax} - \mu_{nmin})}{1 + \left\{ \frac{ND}{C_{r,n}} \right\}^{\alpha,n}} - \frac{\mu_{1,n}}{1 + \left| \frac{N}{D} \right|^{\beta,n}} \tag{3}$$

$$\mu_p = \mu_{pmin} \exp\left(\frac{-P_{c,p}}{NA}\right) + \frac{(\mu_{pmax} - \mu_{pmin})}{1 + \left\{ \frac{NA}{C_{r,p}} \right\}^{\alpha,p}} - \frac{\mu_{1,p}}{1 + \left| \frac{N}{A} \right|^{\beta,p}} \tag{4}$$

3. Shockley-Read-Hall recombination using concentration dependent lifetimes qui est utilisé pour le calcul de taux de recombinaison des porteurs de charge et il est donné comme suit [11]:

$$R_{SRH} = \frac{pn - n^2}{\tau_n \left[n + n_i \exp\left(\frac{ETRAP}{KT_L}\right) \right] + \tau_p \left[p + p_i \exp\left(\frac{-ETRAP}{KT_L}\right) \right]} \tag{5}$$

4. Self-Consistent Coupled Schrödinger Poisson model est utilisé pour modéliser l'effet de confinement quantique des porteurs et il est exprimé en 1D par :

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m_e^*} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) + E_C(x) \Psi_i = E_i \Psi_i \tag{6}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m_h^*} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) - E_V(x) \Psi_i = E_i \Psi_i \tag{7}$$

Annexe B: Paramètres des matériaux utilisés

Tableau 2. Paramètres des matériaux à 300 K [12]

Paramètres	Si	Si _{0,8} Ge _{0,2}
T=300 K		
E _g (eV)	1,1	0,78
ε (F/cm)	11,8	11,8
χ(eV)	4,07	4,17
N _c (cm ⁻³)	2,8*10 ¹⁹	1,92*10 ¹⁹
N _v (cm ⁻³)	1,04*10 ¹⁹	8,2*10 ¹⁸
MUN(cm ² /V.s)	1000	1430
MUP (cm ² /V.s)	500	480
n _i (cm ⁻³)	1,5*10 ¹⁰	3,52*10 ¹²
m _e [*] /m ₀	0,98	0,92
m _n [*] /m ₀	0,49	0,203
τ _n (s)	1*10 ⁻⁶	3*10 ⁻⁶
τ _p (s)	1*10 ⁻⁶	1*10 ⁻⁵
N _D (cm ⁻³)	5*10 ¹⁸	-
N _A (cm ⁻³)	5*10 ¹⁸	-

VI. REFERENCE

- [1] D.B. Bushnell, K.W. Barnham, *Appl. Phys. Lett.* 75 (26) (1999) 4195–4197.
- [2] Thèse de doctorat d'Université de Toulouse III (France), M. Petibon Stéphane, le 20/01/2009, « Nouvelles architectures distribués de gestion et de conversion de l'énergie pour les applications photovoltaïques ».
- [3] K. W. J. Barnham and G. Duggan, "A new approach to high-efficiency multi-band-gap solar cells," *J. Appl. Phys.*, vol. 67, pp. 3490–3493, 1990.
- [4] K. W. J. Barnham, B. Braun, J. Nelson, M. Paxman, C. Button, J. S. Roberts, and C. T. Foxon, "Short-circuit current and energy efficiency enhancement in a low-dimensional structure photovoltaic device," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 59, pp. 135–137, 1991..
- [5] K. H. Jun, J. Daey Ouwens, R. E. I. Schropp, J. Y. Lee, J. H. Choi, H. S. Lee, and K. S. Lim, "Low degradation and fast annealing effects of amorphous silicon multilayer processed through alternate hydrogen dilution," *J. Appl. Phys.*, vol. 88, pp. 4881–4888, 2000.
- [6] K. H. Jun, J. K. Rath, and R. E. I. Schropp, "Enhanced light absorption and photosensitivity in amorphous silicon germanium/amorphous silicon multilayer," *Sol. Energ. Mat. Sol. C.*, vol. 74, pp. 357–363, 2002.
- [7] M. L. W. Thewalt, D. A. Harrison, C. F. Reinhart, J. A. Wolk, and H. Lafontaine, "Type II band alignment in Si_{1-x}Ge_x/Si (001) quantum wells: the ubiquitous type I luminescence results from band bending," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 79, pp. 269–272, 1997.
- [8] D. B. Bushnell and K. W. Barnham, "Strain-balanced GaAsP/InGaAs quantum well solar cells," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 75, pp. 4195–4197, 1999.
- [9] M. Mazzer, K. W. J. Barnham, I. M. Ballard, A. Bessiere, A. Ioannides, D. C. Johnson, M. C. Lynch, T. N. D. Tibbits, J. S. Roberts, G. Hill, and C. Calder, "Progress in quantum well solar cells," *Thin Solid Films*, vol. 511–512, pp. 76–83, 2006.
- [10] MASETTI G., M.SEVERI, AND S.SOLMI, "Modeling of Carrier Mobility against Carrier Concentration in Arsenic, Phosphorous and Boron doped Silicon", *IEEE Trans. Elec. Dev.* ED-30, (1983): 764-769.
- [11] D.J. Roulston, N.D. Arora, and S.G. Chamberlain, "Modeling and Measurement of Minority-Carrier Lifetime versus Doping in Diffused Layers of n ±p Silicon Diodes", *IEEE Trans. on Electron Devices*, ED-29, Feb. 1982, p. 284-291.
- [12] Schaffler F., in *Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe*. Eds. Levinshtein M.E., Rumyantsev S.L., Shur M.S., John Wiley & Sons, Inc., New York, 2001, 149-188.