

**«ELABORATION
CONCENTRATIONS DES EXCITONS ET DES ELECTRONS DANS UNE PHOTOPILE»**

Dédicaces

Ce travail est dédié à:

Mes feux grands parents

- ✓ **Khady DIOUM**
- ✓ **Cheikh GUEYE**

Que le bon Dieu les accueille au paradis.

Mon oncle **Cheikh Tidiane NDIAYE**: *je ne saurai trouver les mots qu'il faut pour vous exprimer ma profonde gratitude. Vous êtes un Homme qui a été toujours là pour vos fils, un Homme d'exception, mon idole de tous les jours*
Trouvez dans ce travail le témoignage de mon profond amour et de mon éternelle reconnaissance.

- ✓ Ma femme pour sa patience et sa compréhension
- ✓ Mes frères et sœurs
- ✓ Mes professeurs notamment **Monsieur Cheikh Mbow**
(mention spéciale)
- ✓ Mes amis:

Dame Wilane - Momar SALL – Baba NDIAYE - Abdoulaye BABOU

Tous (tes) ceux (celles) qui, de près ou de loin, m'ont soutenu tout au long de mon cursus.

Remerciements

*Je tiens tout d'abord à remercier Monsieur **Bassirou BA** Professeur titulaire à la faculté des sciences et techniques de l'université Cheikh Anta Diop de Dakar et responsable du Master 2 ENERGIE SOLAIRE MATERIAUX ET SYSTEMES (SOLMATS) pour m'avoir accepté dans ce master, pour votre entière disponibilité, vos remarques constructives et votre participation au jury.*

*Mes remerciements à Monsieur **Joseph SARR** Professeur titulaire qui m'a fait l'honneur de présider le jury de ce mémoire, et à Monsieur **Mamadou lamine SOW** Maitre de conférences qui a eu la bienveillance de participer à ce jury.*

*Monsieur **Cheikh MBOW**, Maitre-assistant à la faculté des sciences et techniques de l'université Cheikh Anta Diop de Dakar qui a bien voulu diriger ce travail. Vous m'avez fait bénéficier de votre savoir tout au long de ce travail. J'exprime toute ma reconnaissance à vous pour votre implication, votre disponibilité dans ce travail de recherche et plus particulièrement pour vos conseils et votre aide. Que Dieu le tout puissant vous soutienne dans toutes vos entreprises.*

*Je terminerai en remerciant vivement mon oncle **Cheikh Tidiane NDIAYE** et ma tante **Absatou DIOP** qui ont fait de moi l'homme que je suis et qui m'ont soutenu tout au long de mon cursus, mes parents **Oumy GUISSSE** et **Cheikh BAKHOUM**, mon épouse, mes frères et sœurs pour leurs soutiens et leurs encouragements.*

Merci beaucoup

Table des matières

INTRODUCTION GENERALE.....	Erreur ! Signet non défini.
Chapitre I: Modélisation théorique et numérique.....	3
I. Théorie des excitons	4
II. Modélisation mathématique	5
1. Position du problème.....	5
2. Hypothèses simplificatrices et conditions aux limites	8
3. Equations de fonctionnement adimensionnelles	9
III. Modélisation numérique	10
1. Maillage et discrétisation des équations	11
2. Méthode de résolution des systèmes algébriques.....	15
3. Algorithme de résolution	118
Conclusion	20
Chapitre II: Résultats et commentaires.....	21
I. Sur le code de calcul	22
II. Quelques résultats et commentaires	22
1. Conditions de calcul	22
2. Quelques résultats.....	23
CONCLUSION GENERALE.....	30

LISTES DES FIGURES

Figure:1-1	<i>Photopile de type n^+p</i>	page 5
Figure:1-2	<i>Schéma de la jonction n^+p</i>	page 7
Figure:1-3	<i>Discrétisation du domaine</i>	page 12
Figure:2-1	<i>Distributions des électrons et des excitons en fonction de la profondeur de la cellule pour $b = 10^{-6}$; $b_s = 0$; $f_e = 1$ avec une recombinaison en surface pour les excitons $S_x = S_e = 10^8 \text{ cm. s}^{-1}$</i>	page 24
Figure:2-2	<i>Distributions des électrons et des excitons en fonction de la profondeur de la cellule pour $b = 10^{-6}$; $b_s = 0$; $f_e = 0,5$ avec une recombinaison en surface pour les excitons $S_x = S_e = 10^8 \text{ cm. s}^{-1}$</i>	page 24
Figure:2-3	<i>Distributions des électrons et des excitons en fonction de la profondeur de la cellule pour $b = 10^{-6}$; $b_s = 0$; $f_e = 1$ $n_x(0) = n_{x0}$</i>	page 25
Figure:2-4	<i>Distributions des électrons et des excitons en fonction de la profondeur de la cellule pour $b = 10^{-6}$; $b_s = 10^{-4}$; $f_e = 1$ $n_x(0) = n_{x0}$</i>	page 25
Figure:2-5	<i>Distributions des électrons et des excitons en fonction de la profondeur de la cellule pour $b = 10^{-10}$; $b_s = 0$; $f_e = 1$ $S_x = S_e = 10^8 \text{ cm. s}^{-1}$</i>	page 26
Figure:2-6	<i>Distributions des électrons et des excitons en fonction de la profondeur de la cellule pour $b = 10^{-10}$; $b_s = 0$; $f_e = 0,5$ $S_x = S_e = 10^8 \text{ cm. s}^{-1}$</i>	page 26
Figure:2-7	<i>Distributions des électrons et des excitons en fonction de la profondeur de la cellule pour $b = 10^{-16}$; $b_s = 0$; $f_e = 1$ $S_x = S_e = 10^8 \text{ cm. s}^{-1}$</i>	page 27
Figure:2-8	<i>Distributions des électrons et des excitons en fonction de la profondeur de la cellule pour $b = 10^{-16}$; $b_s = 0$; $f_e = 1$ $n_x(0) = n_{x0}$</i>	page 27
Figure:2-9	<i>Distributions des électrons et des excitons en fonction de la profondeur de la cellule pour $b = 10^{-16}$; $b_s = 0$; $f_e = 0,5$ $S_x = S_e = 10^8 \text{ cm. s}^{-1}$ 27.</i>	page 28
Figure:2-10	<i>Distributions des électrons et des excitons en fonction de la profondeur de la cellule pour $b = 10^{-16}$; $b_s = 10^{-4}$; $f_e = 1$ $n_x(0) = n_{x0}$</i>	page 28

LISTE DES TABLEAUX

Tableau N°1	<i>Expressions des grandeurs figurant dans les relations (III-1) et (III-2)</i>	page 11
-------------	---	---------

Nomenclature

➤ Lettres latines

C	taux de conversion	$m^{-3}s^{-1}$
D	Coefficient de diffusion.....	m^2s^{-1}
E	Champ électrique.....	Vm^{-1}
Eg	Energie de la bande interdite ou de gap.....	J ou eV
El	Energie de liaison d'un électron.....	J ou eV
G	Taux de génération.....	$Ncm^{-3}s^{-1}$
J	Densité de courant.....	$mA.cm$
K	Constante de Boltzmann.....	JK^{-1}
L	Longueur de diffusion.....	m
n	Concentration des porteurs.....	cm^{-3}
N	Densité équivalente d'état	cm^{-3}
q	La charge électrique	C
S	Vitesse de recombinaison	$cm.s^{-1}$
T	La température ambiante.....	K
U	Taux de recombinaison	$m^{-3}s^{-1}$
V	Tension.....	V
W	Largeur de la zone de déplétion	μm^{-1}

➤ Symboles grecs

α	Coefficient d'absorption.....	cm^{-1}
λ	Longueur d'onde	μm^{-1}
μ	Mobilité des porteurs	$m^2V^{-1}s^{-1}$
τ	Durée de vie des porteurs.....	s
Δ_n	Densité des porteurs.....	cm^{-3}

➤ Indices

A	Accepteur
D	Donneur
e	Relatif à l'électron
x	Relatif à l'exciton
h	Relatif au trou
i	Intrinsèque
o	A l'équilibre

➤ Exposants

(*)	Relatif aux grandeurs adimensionnelles
©	Relatif à une constante

➤ Nombres caractéristiques

F_o	Nombre de Fourier
$A = \frac{\mu_e \tau_e E_m}{w}$	
$B = \tau b N$	
$R_N = \frac{N_m^x}{N_m}$	



INTRODUCTION GENERALE

Ces dernières années, l'effet significatif des excitons sur le rendement des photopiles, les mécanismes de génération-recombinaison ont été établis. Ceci aboutit à une progression ascendante dans la recherche de l'effet des excitons sur les propriétés des semi-conducteurs. Récemment l'effet des excitons sur le courant de conduction n'a pas été étudié parce que les excitons sont neutres et leur population à la température ambiante dans les semi-conducteurs a été toujours considérée comme insignifiante. Ce point de vue a été changé par Hangleiter [1-2] qui avait mis en évidence le rôle des excitons dans la recombinaison par l'intermédiaire des impuretés profondes et dans des processus intrinsèques, tels que la recombinaison de bande-à-bande et d'Auger. Cela a été confirmé expérimentalement par beaucoup d'auteurs et notamment par R. Hacker et A. Hangleiter [3] et par P. P. Altermatt et al [4]. D'ailleurs, Kane et Swanson [5] ont proposé que la densité des excitons à la température ambiante au sein du silicium peut approcher celle des porteurs minoritaires et pourrait faire sentir leur présence. De plus, Green [6-7] a prolongé la théorie de Kane [5] et de Swanson [5] pour étudier les procédés des courants de conduction et des phénomènes de recombinaison, tenant compte de l'effet des excitons. Corkish [8] et Al ont appliqué la théorie aux diodes et aux piles solaires et ont montré une diminution significative du courant de saturation et une augmentation simultanée du photo-courant quand la longueur de diffusion des excitons excède celle des porteurs minoritaires.

D'autres chercheurs et notamment Zhang [9] ont prouvé que l'effet des excitons sur le courant de saturation est très sensible aux conditions aux limites pour l'excédent des excitons au bord de la région de déplétion (ZCE). Il a été suggéré que les excitons peuvent significativement améliorer la capacité des piles solaire en raison de l'effet des impuretés photovoltaïques provoquées par la modulation de la recombinaison des excitons.

Très récemment, Green [6-7] a prouvé que du niveau modéré aux plus hauts niveaux de dopage, la concentration des excitons peut approcher la concentration des porteurs minoritaires. Cependant cette théorie basée seulement sur le flux des porteurs minoritaires est incomplète. En effet ce modèle se limite à un traitement analytique de la région quasi-neutre de p de celui de la jonction de n^+p , la dissociation des excitons et la recombinaison ont été considérées seulement dans le volume de p et supposées uniformes.

Nous prolongerons ici ce modèle à des structures plus réalistes de pile solaire. Nous incluons la zone de charge d'espace (ZCE) et la non-uniformité de la dissociation des excitons dans le volume (causée ici par la présence du champ) et en occurrence la dissociation en surface des excitons et une recombinaison aux contacts et à la jonction. Notre modèle étant donc régi par deux équations fortement non linéaires et couplées avec des conditions aux limites en général de troisième type, une méthode numérique de résolution s'impose afin de déterminer les champs des porteurs (électrons et excitons) qui permettent de trouver les autres grandeurs nécessaires dans le fonctionnement des photopiles.

C'est pourquoi nous nous proposons de mettre au point un code de calcul fiable et accessible et interactif pour trouver les paramètres phénoménologiques d'une photopile. Pour se faire, nous divisons notre manuscrit en deux chapitres:

Dans le premier chapitre après avoir rappelé quelques travaux majeurs relatifs à la théorie des excitons, nous avons modélisé d'abord théoriquement notre problème. Pour résoudre le système d'équations complétées par leurs conditions aux limites, nous les avons intégrées numériquement grâce à la méthode des volumes finis. Les équations algébriques issues de la discrétisation sont résolues en combinant la méthode de double balayage avec une méthode de relaxation ligne par ligne.

Le deuxième chapitre expose certains résultats issus des simulations numériques à partir de notre code de calcul.

Chapitre I : Modélisation théorique et numérique

I. Théorie des excitons

Dans la théorie classique appliquée aux semi-conducteurs, seuls la génération, la recombinaison et le transport des porteurs libres (les électrons et les trous) sont pris en compte. Du point de vue énergétique un cristal isolant peut être représenté schématiquement par deux bandes. La bande inférieure, dite bande de valence, est formée de niveaux énergétiques tous occupés par des électrons ; la bande supérieure appelée bande de conduction est formée de niveaux inoccupés. Une zone conventionnellement appelée interdite s'étend entre les deux bandes. Par absorption de lumière un électron qui se trouvait dans l'état fondamental peut être porté à un niveau énergétique excité, c'est-à-dire passé de la bande de valence à la bande de conduction.

L'étude du problème à un électron montre que le niveau énergétique excité le plus bas est obtenu lorsque l'électron est élevé au niveau le plus bas de la bande de conduction et que corrélativement un trou apparaît sur le niveau le plus élevé de la bande de valence. Cette présentation conduit à admettre que le plus petit quantum d'énergie qui peut être absorbé correspond exactement à la largeur de la bande interdite. Cependant il a été observé, dans beaucoup de cas, que l'absorption de lumière donne lieu à une série de niveaux énergétiques inférieurs à la bande de conduction qui exigent une énergie d'excitation inférieure à l'écart entre les deux bandes.

L'apparition de ces niveaux d'excitation intermédiaire est liée à l'action du champ périodique du réseau sur l'électron mais au fait que ce dernier interagit avec le trou qu'il a laissé derrière lui après excitation il devient nécessaire de considérer le problème à deux particules: l'électron et le trou en interaction et se propageant dans le potentiel périodique. Un schéma très simple analogue à celui de l'atome d'hydrogène consiste à admettre que les particules sont chargées négativement et positivement et sont douées de masses effectives données.

Un tel complexe formé d'électron et de trous est appelé exciton et son énergie est inférieure à celle de l'électron et du trou pris séparément.

Donc on peut dire que dans les matériaux semi-conducteurs, une quasi-particule appelée exciton se manifeste par la présence d'un pic d'absorption situé à une énergie plus faible que l'énergie de la bande interdite du matériau. La différence entre les deux énergies est l'énergie de liaison E_l de l'exciton, et le pic excitonique n'est observable que lorsque l'énergie de liaison est forte devant l'énergie thermique $E_l \gg K_B T$. Toutefois il a été souligné que la densité de

l'exciton libre dans le semi-conducteur à la température ambiante a un impact sur la densité des porteurs minoritaires.

II. Modélisation mathématique

1. Position du problème

Dans ce travail on met l'accent sur la technique de modélisation des cellules solaires en présence des excitons dans un semi-conducteur de jonction n^+p . Cette modélisation nous a permis de faire une résolution analytique et numérique du problème physique. Cette jonction est composée de deux régions (figure 1-1): une région de type n^+ et une région de type p . La région de type p est divisée de deux zones: une zone de charge d'espace où règne le champ électrique \vec{E} et une zone quasi-neutre ou il est négligeable.

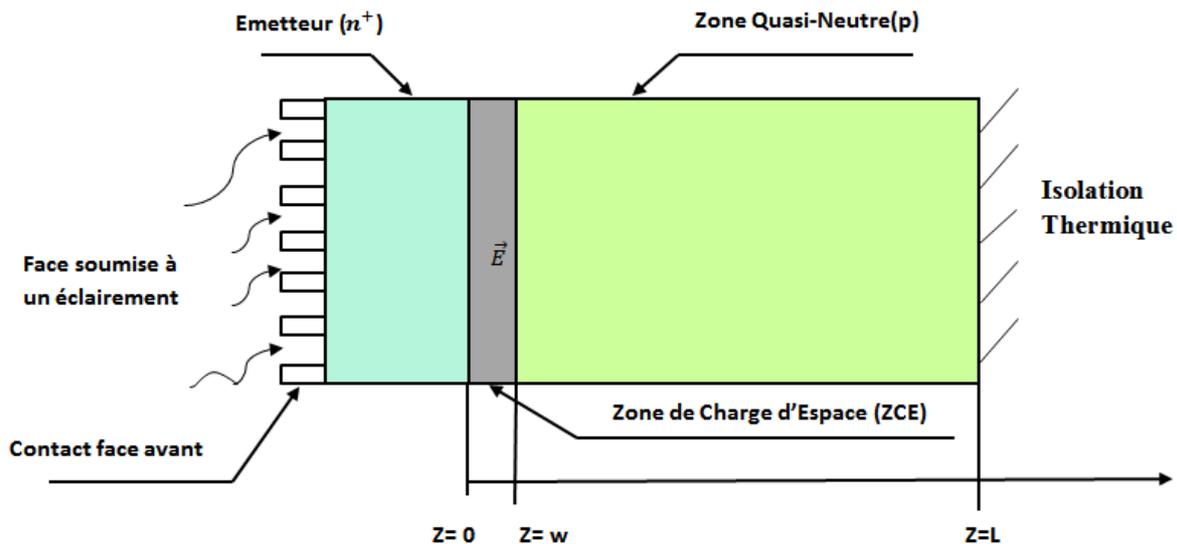


Figure 1-1: Photopile de type n^+p

Toute absorption optique est due à la génération des paires libres d'électrons-trous et des excitons car les autres mécanismes d'absorption sont négligés. Pour les matériaux organiques l'absorption des excitons est dominante ($f_x \cong 1$) pour toutes longueurs d'ondes absorbées. Pour modéliser le transport dynamique des excitons, on considère un problème physique de forme mono-moléculaire simple de recombinaison directe (ou annihilation).

$$\mathbf{U}_x = \frac{1}{\tau_x} (\mathbf{n}_x - \mathbf{n}_{x0}) \quad (\text{II} - 1)$$

Les excitons en se dissociant peuvent se convertir en paires libres d'électron-trou, avec un taux de conversion

$$\mathbf{C}_{x/eh} = -\mathbf{U}_{eh/x} \quad (\text{II} - 2)$$

$$\mathbf{U}_{eh/x} = \mathbf{b}(\mathbf{n}_e \mathbf{n}_h - \mathbf{n}^\odot \mathbf{n}_x) \quad (\text{II} - 3)$$

Le problème se réduit à la détermination de la concentration des électrons $\mathbf{n}_e(\mathbf{x})$ et celle des excitons $\mathbf{n}_x(\mathbf{x})$ dans la gamme $\mathbf{W} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{L}$ (figure 1-2), car dans le modèle de base de Green [1]. et de Zhang [4] seuls les porteurs minoritaires dans la zone quasi-neutre de type-p sont considérés. Dans cette zone le champ électrique est négligeable et par suite le courant des porteurs est essentiellement un courant de diffusion. Leurs distributions sont régies par les équations de diffusion **du système couplé** des électrons et des excitons.

$$\mathbf{D}_e \frac{d^2 \mathbf{n}_e}{d\mathbf{x}^2} = \mathbf{U}_{eh} + \mathbf{b}(\mathbf{n}_e \mathbf{n}_h - \mathbf{n}_x \mathbf{n}^\odot) - \mathbf{f}_e \mathbf{G}_{eh} \quad (\text{II} - 4)$$

$$\mathbf{D}_x \frac{d^2 \mathbf{n}_x}{d\mathbf{x}^2} = \mathbf{U}_x - \mathbf{b}(\mathbf{n}_e \mathbf{n}_h - \mathbf{n}_x \mathbf{n}^\odot) - \mathbf{f}_x \mathbf{G}_x \quad (\text{II} - 5)$$

$\mathbf{G}_{eh} = \mathbf{G}_{eh0} \exp(-\alpha \mathbf{x})$ et $\mathbf{G}_x = \mathbf{G}_{x0} \exp(-\alpha \mathbf{x})$ représentent respectivement les taux de génération des porteurs et des excitons ;

$\mathbf{U}_{eh} = \frac{\Delta n_e}{\tau_e} = \frac{\Delta h}{\tau_h}$ et $\mathbf{U}_x = \frac{\Delta n_x}{\tau_x}$: les taux de recombinaison des porteurs et des excitons ;

Lorsqu'on suppose que le paramètre obligatoire \mathbf{b} est constant dans la RQN à champ libre et que la concentration des trous est constante ($n_h = N_A$), ces équations sont linéaires et peuvent être résolues analytiquement en utilisant les techniques standards. La condition aux limites à la frontière $\mathbf{x} = 0$ pour les électrons et les excitons permet d'évaluer le courant total de ces particules.

$$\mathbf{J}(\mathbf{V}) = \mathbf{q}[\mathbf{J}_e(\mathbf{x} = 0, \mathbf{V}) + \mathbf{J}_x(\mathbf{x} = 0, \mathbf{V})] \quad (\text{II} - 6)$$

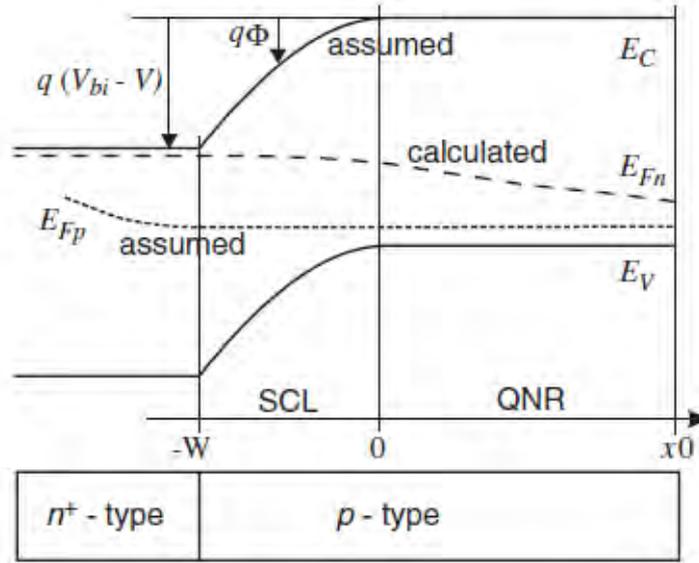


Figure 1-2: Schéma de la jonction n⁺p [10]

L'équation (II-6) suppose implicitement que cette densité est dominée par les électrons dans la zone quasi-neutre ($W \leq x \leq L$) et que tous les excitons dans la zone de charge d'espace ($0 \leq x \leq W$) se convertissent en paire électron-trou et dont les électrons contribuent au courant. Pour vérifier cette dernière hypothèse il est nécessaire de prolonger le modèle de Green-Zhang et d'inclure la zone de charge d'espace.

Les équations (II-4) et (II-5) redeviennent:

$$D_e \frac{d^2 n_e}{dx^2} + \mu_e \frac{d}{dx} (n_e E(x)) = U_{eh} + b(n_e N_A - n_x n^{\odot}) - f_e G_{eh} \quad (\text{II} - 7)$$

$$D_x \frac{d^2 n_x}{dx^2} = U_x - b(n_e N_A - n_x n^{\odot}) - f_x G_x \quad (\text{II} - 8)$$

Le taux de recombinaison ne prend plus la forme simple identique à celle donnée par (II-1) mais est remplacé par l'expression de Shockley-Read.[10]

$$U_{eh} = \frac{1}{\tau_e} \frac{n_e n_h - n_i^2}{n_e + n_h + 2n_i} \quad (\text{II} - 9)$$

Par conséquent les équations différentielles deviennent non linéaires, le problème doit être résolu numériquement.

2. Hypothèses simplificatrices et conditions aux limites

On suppose pour la simplicité une durée de vie égale pour les électrons et les trous. Aussi pour éviter des complications inutiles on limite notre attention uniquement sur les électrons et les excitons.

➤ On pose aussi le champ:

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = \mathbf{E}_m \frac{(w-x)}{w} \quad \text{dans} \quad (0 \leq x \leq w)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad \text{dans} \quad (w \leq x \leq L)$$

On modélise l'augmentation du champ de la dissociation des excitons en introduisant un paramètre de liaison b non uniforme dans la ZCE.

$$\mathbf{b}(\mathbf{x}) = \mathbf{b}[\mathbf{E}(\mathbf{x})]$$

Notre modèle, bien que contenant des simplifications, permet d'étudier les effets qui ont été négligés dans le modèle de base.

Ensuite on traite nos conditions aux limites avec plus d'attention:

La Concentration des électrons à la jonction est donnée par la densité des donneurs à l'émetteur:

$$\checkmark \quad \underline{\mathbf{x} = \mathbf{0}}$$

$$n_e(\mathbf{0}) = N_D$$

$$\mathbf{J}_X(\mathbf{0}) = \mathbf{S}_x(n_x(\mathbf{0}) - n_{x0}) - \mathbf{b}_s(n_x(\mathbf{0}) - n_{x1}) = +D_x \frac{dn_x}{dx} \quad (\text{II} - 10)$$

On donne le courant des particules à la recombinaison en surface et la conversion.

$$\checkmark \quad \underline{\mathbf{x} = \mathbf{L}}$$

$$\mathbf{J}_e(\mathbf{L}) = \mathbf{S}_e(n_e(\mathbf{L}) - n_{e0}) - \mathbf{b}_s(n_x(\mathbf{L}) - n_{x1}) = -D_e \frac{dn_e}{dx} \quad (\text{II} - 11)$$

$$\mathbf{J}_X(\mathbf{L}) = \mathbf{S}_x(n_x(\mathbf{L}) - n_{x0}) + \mathbf{b}_s(n_x(\mathbf{L}) - n_{x1}) = -D_x \frac{dn_x}{dx} \quad (\text{II} - 12)$$

Où S_e et S_x représentent respectivement les vitesses de recombinaison des électrons et des excitons en surface. Les vitesses de recombinaison très élevées ($S_e \rightarrow \infty$) correspondent à un contact ohmique et celles nulles ($S_e = 0$) à une surface parfaitement lisse.

Une autre condition aux limites indépendante peut être trouvée en éliminant le terme b_s des équations (II-11) (II-12)

$$S_e(n_e(L) - n_{e0}) + S_x(n_x(L) - n_{x0}) + D_e \frac{dn_e}{dx}(L) + D_x \frac{dn_x}{dx}(L) = 0 \quad (\text{II} - 13)$$

3. Equations de fonctionnement adimensionnelles

Puisque les équations de notre modèle contiennent beaucoup de paramètres, pour analyser leurs influences il va falloir effectuer un nombre considérable de simulations qui au demeurant ne nous fournit que des renseignements difficilement exploitables. C'est pourquoi il est impératif de les réduire en faisant apparaître des groupements permettant de comparer les principaux effets.

Introduisons les grandeurs de référence suivantes

L: la longueur de notre semi-conducteur ; N_m et N_m^x : les concentrations de référence des électrons et des trous. En posant dans les équations (II-7) et (II-8)

$$x = x^* L \quad ; \quad w = w^* L$$

$$n_i = n_i^* N_m \quad ; \quad n_e = n_e^* N_m \quad ; \quad n_x = n_x^* N_m^x \quad ; \quad n_h = n_h^* N_m$$

On obtient, après calcul, les équations adimensionnelles suivantes:

$$F_{oe} \frac{d^2 n_e^*}{dx^{*2}} + A \frac{d}{dx^*} [n_e^* (w^* - x^*)] = \frac{n_e^* - \frac{n_i^{*2}}{n_h^*}}{1 + \frac{n_e^* + 2n_i^*}{n_h^*}} - B_e R_N \left\{ n_1^* n_x^* - \frac{1}{R_N} n_e^* n_h^* \right\} - C_e \cdot f_e \cdot G^* \quad (\text{II} - 14)$$

$$F_{ox} \frac{d^2 n_x^*}{dx^{*2}} = (n_x^* - n_{x0}^*) + \frac{B_x}{R_N} \left\{ n_1^* n_x^* - \frac{1}{R_N} n_e^* n_h^* \right\} - f_x G^* \cdot C_e \frac{1}{R_N} \quad (\text{II} - 15)$$

Avec

$\mathbf{Fo}_e = \frac{D_e \tau_e}{L^2}$ et $\mathbf{Fo}_x = \frac{D_x \tau_x}{L^2}$: les nombres de Fourier relatifs respectivement aux électrons et aux excitons. Ils comparent leurs durées de vie par rapport aux temps de leurs diffusions dans le matériau

$$A = \frac{\mu_e \tau_e E_m}{w} \quad ; \quad B_e = \tau_e b N_m \quad ; \quad B_x = \tau_x b N_m^x$$

$$R_N = \frac{N_m^x}{N_m} \quad ; \quad C_x = \frac{G_r \tau_e}{N_m^*} \quad ; \quad C_e = \frac{G_r \tau_e}{N_m} \quad ; \quad \frac{C_e}{C_x} = R_N$$

En posant

$$K = \frac{N_m^x b_s}{N_m S_e} \quad ; \quad K' = \frac{b_s}{S_x} \quad ; \quad H_{0x} = \frac{D_x}{S_{0x} L} \quad ; \quad H_{1e} = \frac{D_e}{S_e L} \quad ; \quad H_{1x} = \frac{D_x}{S_x L}$$

Les conditions aux limites (II-10)-(II-11) et (II-12) après calcul et arrangement donnent

$$\mathbf{n}_e^*(0) = N_D^*$$

$$[\mathbf{n}_x^*(0) - \mathbf{n}_{e0}^*] + K'[\mathbf{n}_x^*(0) - \mathbf{n}_{x1}^*] = +H_{0x} \frac{d\mathbf{n}_x^*(1)}{d\mathbf{x}^*} \quad (\text{II} - 16)$$

$$[\mathbf{n}_e^*(1) - \mathbf{n}_{e0}^*] - K[\mathbf{n}_x^*(1) - \mathbf{n}_{x1}^*] = -H_{1e} \frac{d\mathbf{n}_e^*(1)}{d\mathbf{x}^*} \quad (\text{II} - 17)$$

$$[\mathbf{n}_x^*(1) - \mathbf{n}_{e0}^*] + K'[\mathbf{n}_x^*(1) - \mathbf{n}_{x1}^*] = -H_{1x} \frac{d\mathbf{n}_x^*(1)}{d\mathbf{x}^*} \quad (\text{II} - 18)$$

III. Modélisation numérique

Pour résoudre les équations non linéaires avec leurs conditions aux limites associées, nous faisons appel à une méthode de résolution numérique parce qu'elle peut être répétée infiniment dans l'espace et dans le temps en obtenant toujours les mêmes résultats contrairement à l'expérience humaine. Ce choix est aussi guidé par le fait que la simulation peut nous donner des résultats quasi- instantanés grâce à la puissance des calculateurs qui sont devenus de plus en plus accessibles.

Pour alléger les écritures, nous avons, dans tout ce qui suit, omis les astérisques () dans toutes les grandeurs adimensionnelles du paragraphe précédent.*

Pour simplifier mettons le système (II-14)-(II-15) sous la forme conservative suivante:

$$\frac{d}{dx} \{ \mathfrak{J}_k(\mathbf{n}_k) \} = \mathbf{G}_k(\mathbf{x}, \mathbf{n}_k, \mathbf{n}_l) \quad (\text{III} - 1)$$

Où désigne $\mathfrak{J}_k(\mathbf{n}_k)$ le « flux » des concentrations \mathbf{n}_k défini par:

$$\mathfrak{J}_k(\mathbf{n}_k) = \mathbf{V}_k \cdot \mathbf{n}_k - \mathbf{F}_{ok} \cdot \frac{d\mathbf{n}_k}{dx} \quad (\text{III} - 2)$$

Ici les indices \mathbf{k} et \mathbf{l} sont relatifs aux électrons et aux excitons et sont tels que

Si $\mathbf{k} = \mathbf{e}$ alors $\mathbf{l} = \mathbf{x}$ et si $\mathbf{k} = \mathbf{x}$ alors $\mathbf{l} = \mathbf{e}$

Les grandeurs $\mathbf{V}_k, \mathbf{F}_{ok}$ et $\mathbf{G}_k(\mathbf{x}, \mathbf{n}_k, \mathbf{n}_l)$ sont consignées dans le tableau suivant:

Tableau III – 1 Expressions des grandeurs figurant dans les relations (III- 1) et (III- 2)

	Pour les électrons	Pour les excitons
V_K	$-A \cdot w^*$	0
F_{OK}	F_{oe}	F_{ox}
$G_k(x, n_k, n_l)$	$-\frac{d}{dx^*} (Ax^* n_e^*) - \frac{n_e^* \frac{n_l^{*2}}{n_p^*}}{1 + \frac{n_e^* + 2n_l^*}{n_p^*}} +$ $B_e R_N \left\{ n_1^* n_x^* - \frac{1}{R_N} n_e^* \cdot n_p^* \right\} + C_e \cdot f_e \cdot G^*$	$-(n_x^* - n_{x0}^*) -$ $\frac{B_x}{R_N} \left\{ n_1^* n_x^* - \frac{1}{R_N} n_e^* n_p^* \right\} +$ $f_x G^* \cdot C_e \frac{1}{R_N}$

1. Maillage et discrétisation des équations

Tout d’abord nous allons approcher le segment continu $[0 ; 1]$ en une série de I_m points (nœuds) d’abscisses notées x_i . Comme les différentes régions de notre domaine (la zone de charge d’espace et la base) ne sont pas de mêmes dimensions et sont le siège de phénomènes physiques de natures très différentes il convient d’utiliser un maillage variable. Les distributions des électrons et des excitons étant très sensibles aux phénomènes de surface un maillage fin au voisinage de $x = 0$ et de $x = 1$ est adopté. Nous allons donc utilisé le maillage de type trigonométrique (voir figure III. 1) suivant:

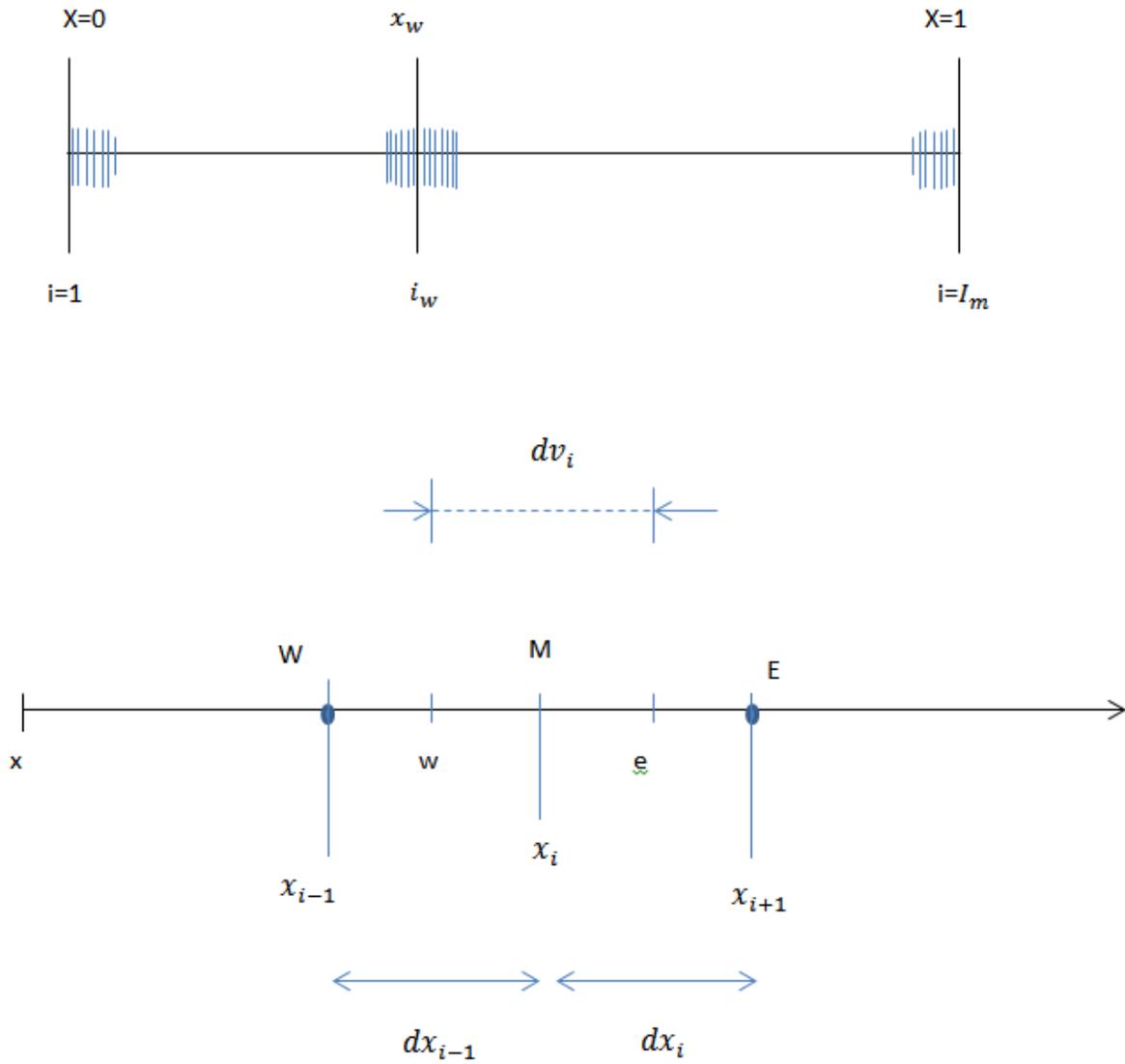


FIGURE 1-3: Discrétisation du domaine

Dans la zone de charge d'espace

$$\mathbf{x}_i = \mathbf{0}, 5. \mathbf{w}. \left\{ \mathbf{1} - \cos \left[\frac{\pi(\mathbf{i} - \mathbf{1})}{\mathbf{i}_w - \mathbf{1}} \right] \right\} \quad (\text{III} - 3. \text{a})$$

Dans la base

$$\mathbf{x}_i = \mathbf{w} + \mathbf{0}, 5. (\mathbf{1} - \mathbf{w}). \left\{ \mathbf{1} - \cos \left[\frac{\pi(\mathbf{i} - \mathbf{1})}{\mathbf{I}_m - \mathbf{i}_w} \right] \right\} \quad (\text{III} - 3. \text{b})$$

Dans ces relations \mathbf{I}_w est l'indice qui repère la position de l'interface zone de charge d'espace/base.

Les pas de discrétisation sont alors donnés par

$$\mathbf{dx}_i = \mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i \quad (\text{III} - 4)$$

Le segment centré autour du nœud d'abscisse \mathbf{x}_i appelé «volume de contrôle» et délimité par les nœuds (\mathbf{w}) et (\mathbf{e}) a pour longueur

$$\mathbf{dv}_i = \mathbf{0}, 5. (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{i-1}) \quad (\text{III} - 5)$$

Si nous considérons le nœud \mathbf{x}_i d'abscisse nous notons:

$$(\delta \mathbf{x})_e = \mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i \quad (\text{III} - 6. \text{a})$$

et

$$(\delta \mathbf{x})_w = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{i-1} \quad (\text{III} - 6. \text{b})$$

En intégrant maintenant le système (III-1) dans le volume de contrôle \mathbf{dv}_i il vient alors

$$[\mathfrak{F}_k(\mathbf{n}_k)]_e - [\mathfrak{F}_k(\mathbf{n}_k)]_w = \mathbf{dv}_i \cdot \overline{\mathbf{G}_k(\mathbf{x}_i, \mathbf{n}_k, \mathbf{n}_l)} \quad (\text{III} - 7)$$

Avec $\overline{G_k(x_i, n_k, n_l)}$ la valeur moyenne de $G_k(x, n_k, n_l)$ définie par

$$\overline{\mathbf{G}_k(\mathbf{x}_i, \mathbf{n}_k, \mathbf{n}_l)} = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{dv}_i} \cdot \int_w^e \mathbf{G}_k(\mathbf{x}, \mathbf{n}_k, \mathbf{n}_l) \cdot \mathbf{dx}$$

Après calcul le système (III - 7) se ramène à

$$- \mathbf{a}_{w,k} \cdot \mathbf{n}_{k,i-1} + \mathbf{a}_{M,k} \cdot \mathbf{n}_{k,i} - \mathbf{a}_{e,k} \cdot \mathbf{n}_{k,i+1} = \mathbf{s}_{m,k} \quad (\text{III} - 8)$$

avec $i = 2, \dots, I_m - 1$ pour $k = e$ et pour $k = x$

Nous obtenons ainsi deux systèmes matriciels tri diagonaux mais fortement non linéaires car les coefficients $\mathbf{a}_{w,k}$, $\mathbf{a}_{M,k}$, $\mathbf{a}_{e,k}$ ainsi que le second membre $\mathbf{s}_{m,k}$ sont des fonctions des inconnues. Pour trouver les distributions des concentrations (pour les électrons et pour les excitons) il va falloir alors inverser deux matrices carrées et s'assurer que leurs diagonales principales (les a_M) soient dominantes. Pour renforcer la dominance des diagonales principales, nous mettons alors le terme source $\mathbf{s}_{m,k}$ sous la forme

$$\overline{\mathbf{G}_k(\mathbf{x}_i, \mathbf{n}_k, \mathbf{n}_1)} = -\overline{\mathbf{G}_{k,M}} \cdot \mathbf{n}_{k,i} + \overline{\mathbf{G}_{k,C}} \quad (\text{III- 9})$$

Avec

$$\overline{\mathbf{G}_{k,M}} = \mathbf{B}_e \cdot \mathbf{n}_p \quad \text{si} \quad \mathbf{k} = \mathbf{e}$$

et

$$\overline{\mathbf{G}_{k,M}} = \frac{\mathbf{B}_x}{\mathbf{R}_N} \cdot \mathbf{n}_1 \mathbf{n}_1^* \quad \text{lorsque} \quad \mathbf{k} = \mathbf{x}$$

En utilisant la loi de puissance de Patankar [11] les coefficients $\mathbf{a}_{w,k}$, $\mathbf{a}_{e,k}$ et $\mathbf{a}_{M,k}$ s'écrivent

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{a}_{w,k} &= \mathbf{D}_{w,k} \cdot \mathbf{A}(|\mathbf{P}_{w,k}|) + \mathbf{Max}[\mathbf{F}_{w,k}; \mathbf{0}] & \text{III - 10. a} \\ \mathbf{a}_{e,k} &= \mathbf{D}_{e,k} \cdot \mathbf{A}(|\mathbf{P}_{e,k}|) + \mathbf{Max}[-\mathbf{F}_{e,k}; \mathbf{0}] & \text{III - 10. b} \\ \mathbf{a}_{M,k} &= \mathbf{a}_{e,k} + \mathbf{a}_{w,k} + \mathbf{d}\mathbf{v}_i \cdot \overline{\mathbf{G}_{k,M}} & \text{III - 10. c} \end{aligned} \right\}$$

Les flux et les conductances sont définis par

$$\mathbf{F}_{e,k} = (\mathbf{V}_k)_e \quad ; \quad \mathbf{F}_{w,k} = (\mathbf{V}_k)_w \quad (\text{III} - 11)$$

$$\mathbf{D}_{e,k} = \frac{(\mathbf{F}_{ok})_e}{(\delta \mathbf{x})_e} \quad ; \quad \mathbf{D}_{w,k} = \frac{(\mathbf{F}_{ok})_w}{(\delta \mathbf{x})_w} \quad (\text{III- 12})$$

Et les nombres de Peclet numériques donnés par

$$P_{e,k} = \frac{(V_k)_e \cdot (\delta x)_e}{(F_{ok})_e} \quad ; \quad P_{w,k} = \frac{(V_k)_w \cdot (\delta x)_w}{(F_{ok})_w} \quad (\text{III} - 13)$$

La fonction $A(P)$ apparaissant dans les relations (III – 8) obéit à la loi de puissance suivante

$$A(|P|) = \text{Max}[(1 - 0, 1 \cdot |P|^5); 0] \quad (\text{III} - 14)$$

Pour compléter les systèmes algébriques il faut leur adjoindre les conditions aux limites discrétisées. Pour cela réécrivons les conditions aux limites sous les formes générales suivantes

$$A_0 \frac{dn_k(0)}{dx} + B_0 \cdot n_k(0) + C_0 \cdot n_l(0) = D_0 \quad \text{à} \quad x = 0 \quad (\text{III} - 15)$$

$$A_1 \frac{dn_k(1)}{dx} + B_1 \cdot n_k(1) + C_1 \cdot n_l(1) = D_1 \quad \text{à} \quad x = 1 \quad (\text{III} - 16)$$

Après discrétisation les conditions aux limites se ramènent à

$$(B_0 \cdot dx_1 - A_0) \cdot n_{k,1} + A_0 \cdot n_{k,2} = (D_0 - C_0 \cdot n_{l,1}) \cdot dx_1 \quad i = 1 \quad (\text{III} - 17. a)$$

$$-A_1 \cdot n_{k,I_m-1} + (B_1 \cdot dx_{I_m-1} + A_1) \cdot n_{k,I_m} = (D_1 - C_1 \cdot n_{l,I_m}) \cdot dx_{I_m-1} \quad i = I_m \quad (\text{III} - 17. b)$$

Les systèmes algébriques que nous nous proposons de résoudre pour trouver les distributions des concentrations des électrons et des excitons sont alors

$$\left. \begin{aligned} (B_0 \cdot dx_1 - A_0) \cdot n_{k,1} + A_0 \cdot n_{k,2} &= (D_0 - C_0 \cdot n_{l,1}) \cdot dx_1 \quad i = 1 \\ -a_{w,k} \cdot n_{k,i-1} + a_{M,k} \cdot n_{k,i} - a_{e,k} \cdot n_{k,i+1} &= s_{m,k} \quad i = 2, \dots, I_m - 1 \\ -A_1 \cdot n_{k,I_m-1} + (B_1 \cdot dx_{I_m-1} + A_1) \cdot n_{k,I_m} &= (D_1 - C_1 \cdot n_{l,I_m}) \cdot dx_{I_m-1} \quad i = I_m \end{aligned} \right\} (\text{III} - \text{Eq})$$

Les systèmes tri diagonaux (III–Eq) obtenus étant fortement non linéaires l'utilisation d'une méthode itérative s'impose donc.

2. Méthode de résolution des systèmes algébriques

Pour résoudre les systèmes tri diagonaux non linéaires nous allons utiliser la méthode de double parcours combinée à une méthode itérative de relaxation ligne par ligne de type Gauss- Siedel.

Les systèmes (III – Eq) admettent des solutions récursives de la forme

$$\mathbf{n}_{k,i} = \alpha_{k,i} \cdot \mathbf{n}_{k,i+1} + \beta_{k,i} \quad \mathbf{i} = \mathbf{I}_m - 1, \dots, 2 \quad (\text{III} - 18)$$

avec $\alpha_{k,i}$ et $\beta_{k,i}$ des coefficients *a priori* connus qui sont donnés par

$$\alpha_{k,i} = \frac{\mathbf{a}_{e,k}}{\mathbf{a}_{M,k} - \alpha_{k,i-1} \cdot \mathbf{a}_{w,k}} \quad (\text{III} - 19. a)$$

$$\beta_{k,i} = \frac{\mathbf{s}_{m,k} + \beta_{k,i-1} \cdot \mathbf{a}_{w,k}}{\mathbf{a}_{M,k} - \alpha_{k,i-1} \cdot \mathbf{a}_{w,k}} \quad (\text{III} - 19. b)$$

Dans ces deux relations l'indice \mathbf{i} varie de 2 à $\mathbf{I}_m - 1$.

Pour trouver les coefficients $\alpha_{k,1}$ et $\beta_{k,1}$ on met la condition aux limites (III – 17.a) sous la forme (III– 18). Après identification il vient

$$\alpha_{k,1} = - \frac{\mathbf{A}_0}{\mathbf{B}_0 \cdot \mathbf{dx}_1 - \mathbf{A}_0} \quad (\text{III} - 20. a)$$

et

$$\beta_{k,1} = \frac{(\mathbf{D}_0 - \mathbf{C}_0 \cdot \mathbf{n}_{l,1}) \cdot \mathbf{dx}_1}{\mathbf{B}_0 \cdot \mathbf{dx}_1 - \mathbf{A}_0} \quad (\text{III} - 20. b)$$

Comme la relation (III–18) se calcule de manière régressive il faut, pour la détermination des $\mathbf{n}_{k,i}$, la donnée de \mathbf{n}_{k,I_m} . En remplaçant \mathbf{n}_{k,I_m-1} par $\alpha_{k,I_m-1} \cdot \mathbf{n}_{k,I_m} + \beta_{k,I_m-1}$ d'après (III–18) alors la condition aux limites (III-17.b) nous donne

$$\mathbf{n}_{k,I_m} = \frac{(\mathbf{D}_1 - \mathbf{C}_1 \cdot \mathbf{n}_{l,I_m}) \cdot \mathbf{dx}_{I_m-1} + \mathbf{A}_1 \cdot \beta_{k,I_m-1}}{\mathbf{B}_1 \cdot \mathbf{dx}_{I_m-1} + \mathbf{A}_1 (1 - \alpha_{k,I_m-1})} \quad (\text{III} - 21)$$

Cependant pour s'assurer que le processus de calcul ne diverge pas à cause des accumulations des erreurs il faut que

$$|\alpha_{k,i}| < 1 \quad \forall i \in [2 ; \mathbf{I}_m - 1]$$

Cette condition de stabilité est respectée si les coefficients des systèmes matriciels vérifient l'inégalité suivante:

$$|\mathbf{a}_{M,k}| > |\mathbf{a}_{w,k}| + |\mathbf{a}_{e,k}|$$

En analysant les relations (III – 10) nous voyons que le schéma que nous avons choisi respecte toujours ce critère de stabilité.

➤ **Principe de la méthode de double balayage ou algorithme de Thomas**

Si nous connaissons tous les coefficients qui apparaissent dans les relations (III – Eq), nous pouvons alors calculer les coefficients $\alpha_{k,i}$ et $\beta_{k,i}$ grâce aux relations (III-19) en faisant varier i de 2 jusqu'à $I_m - 1$. En partant de la valeur de n_{k,I_m} donnée par l'expression (III – 21) nous pouvons alors déterminer les $n_{k,i}$ en variant i en sens inverse c'est-à-dire de $I_m - 1$ jusqu'à 2.

Mais étant donné que les coefficients des matrices sont des fonctions des inconnues $n_{k,i}$, pour appliquer la méthode à double balayage, il va falloir utiliser une méthode itérative.

➤ **Principe de la méthode itérative**

En se donnant des profils arbitraires notés $n_{k,i}^m$ des densités $n_{k,i}$ à l'itération (m), nous pouvons en déduire les coefficients des matrices et trouver grâce à l'algorithme de Thomas des nouvelles distributions des densités $n_{k,i}^{est}$ que nous mettons sous la forme

$$n_{k,i}^{est} = F(n_{k,i}^m, n_{l,i}^m, x_i) \quad (III - 22)$$

Si l'écart entre les profils arbitraires et ceux estimés n'est pas suffisamment petit alors nous allons passer à l'itération suivante ($m + 1$) en remplaçant $n_{k,i}^m$ par:

$$n_{k,i}^{m+1} = (1 - \omega) \cdot n_{k,i}^m + \omega \cdot F(n_{k,i}^m, n_{l,i}^m, x_i) \quad (III - 23)$$

avec ω le paramètre d'itération tel que $0 < \omega < 2$. Si $0 < \omega < 1$ la méthode itérative est dite de sous- relaxation. On parlera de méthode de sur- relaxation lorsque $1 < \omega < 2$. Dans le cas où $\omega = 1$ la méthode est dite méthode du point fixe qui ne converge que quand $\left| \frac{dF}{dx} \right| < 1$ pour tout x appartenant au domaine d'étude.

Lorsque $n_{k,i}^{m+1}$ est proche de $n_{k,i}^m$ alors la valeur de $n_{k,i}$ trouvée est considérée comme solution du système (III – Eq) aux erreurs de machine et de méthode près. Pour critère d'arrêt nous prenons, pour chaque espèce (les électrons et les excitons)

$$Max \left\{ \frac{\sum_{i=1}^{I_m} |n_{e,i}^{m+1} - n_{e,i}^m|}{\sum_{i=1}^{I_m} |n_{e,i}^{m+1}|}, \frac{\sum_{i=1}^{I_m} |n_{x,i}^{m+1} - n_{x,i}^m|}{\sum_{i=1}^{I_m} |n_{x,i}^{m+1}|} \right\} \leq \varepsilon \quad (III - 24)$$

3. Algorithme de résolution

Dans ce paragraphe nous exposons les différentes étapes du processus de calcul.

Etape 1 On donne toutes les constantes physiques, géométriques et numériques qui rentrent dans les systèmes d'équations discrétisées. Il faut aussi imposer un autre critère d'arrêt lorsque le nombre d'itérations devient prohibitif. On posera m_{max} le nombre d'itérations maximal imposé

Etape 2 On initialise le compteur d'itération $m = 1$ et on donne les profils arbitraires des électrons et des excitons ($n_{e,i}^m$ et $n_{x,i}^m$)

Etape 3 On calcule les coefficients des équations (III – 17) traduisant les conditions aux limites pour les électrons.

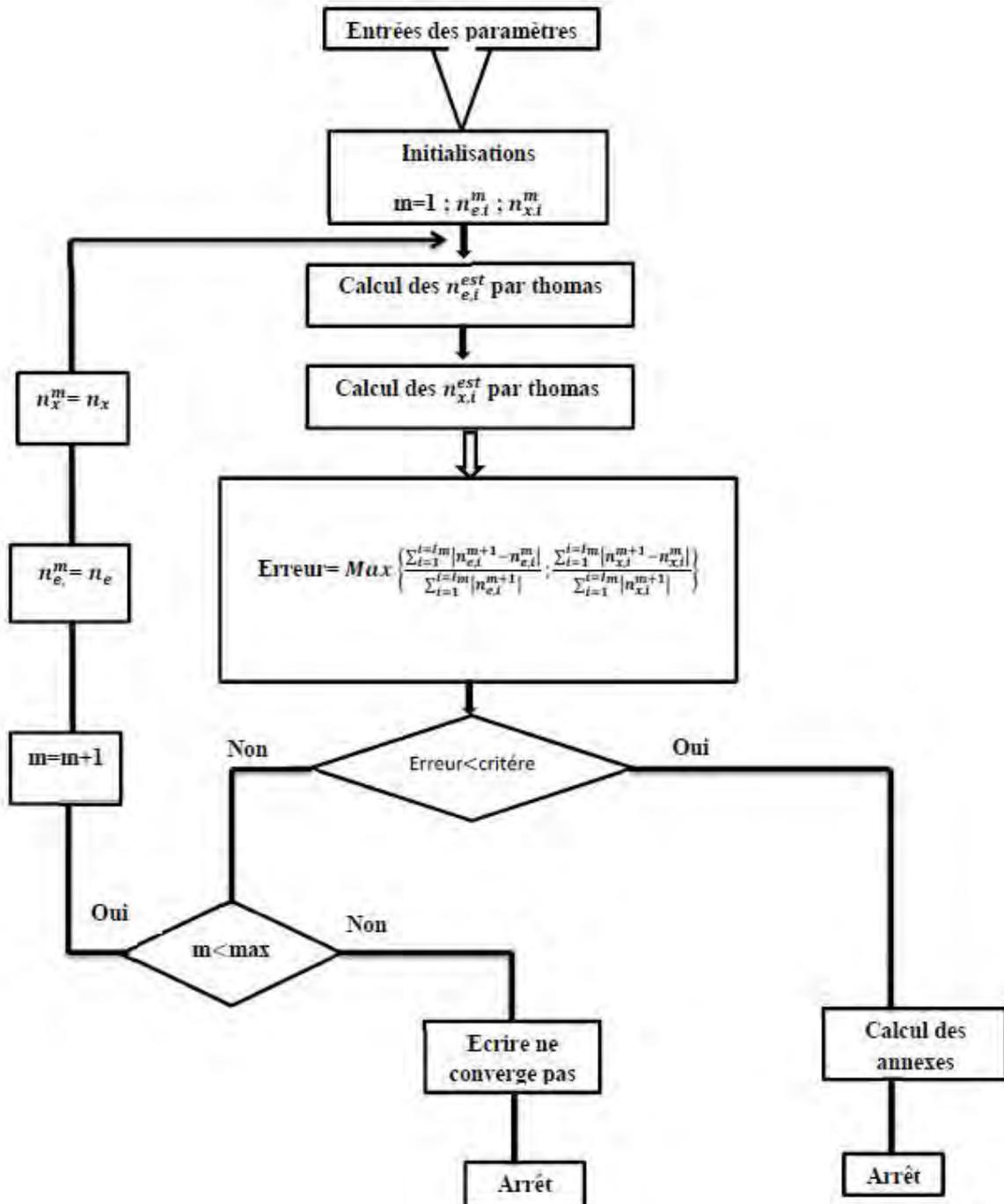
Etape 4 On détermine la distribution des densités des électrons pour trouver les $n_{e,i}^{est}$ avec l'algorithme de Thomas.

On va maintenant déterminer les densités des excitons

Etape 5 On utilise les densités $n_{e,i}^{est}$ pour calculer les coefficients des équations (III – 17) pour les excitons.

Etape 6 On détermine la concentration des excitons $n_{x,i}^{est}$ grâce à l'algorithme de Thomas

Etape 7 Si le test (III – 24) est satisfait, on fait les calculs annexes et on arrête le programme. Sinon on vérifie d'abord si $m = m_{max}$; si tel est le cas on arrête les calculs afin de chercher les sources de non convergence. Dans le cas contraire on augmente l'incrément m d'une unité, on remplace $n_{e,i}^m$ et $n_{x,i}^m$ par $n_{e,i}^{m+1}$ et $n_{x,i}^{m+1}$ données par la relation (III – 23) et on retourne à l'**Etape 3**.



Conclusion

Dans ce travail, nous avons prolongé le modèle standard de semi-conducteur des piles solaires en y incluant les effets des excitons, du champ dans la zone de déplétion et en utilisant le modèle de Shockley-Read pour le taux de recombinaison en volume. Il s'en suit que nous obtenons un modèle fortement non linéaire qui nécessite de facto l'usage d'une méthode numérique pour la détermination des densités des porteurs. Pour intégrer nos équations nous avons choisi la méthode volume de contrôle et utilisé la méthode de double balayage combinée à un schéma itératif pour résoudre les équations discrétisées. Enfin nous avons donné les conditions de stabilité.



CHAPITRE II : RESULTATSET COMMENTAIRES

I. Sur le code de calcul

Le code de calcul que nous avons mis au point est écrit en *Fortran 95*. Il comprend un programme principal et trois sous- programmes. Le premier nous donne le maillage du domaine. Le second résout les systèmes d'équations par la méthode de Thomas et le troisième calcule les coefficients issus de la discrétisation par la méthode de Patankar.

Lors de l'exécution le programme **demande** les données numériques (critère d'erreur, paramètre de relaxation), géométriques (longueurs de la cellule et de l'émetteur) et physiques (concentrations des donneurs, intrinsèque, la longueur d'onde et l'irradiance spectrale correspondante) qui rentrent dans les calculs ainsi que les types de conditions aux limites (conditions de Dirichlet, de Neumann, de Robin). Ensuite il calcule les grandeurs intermédiaires comme les longueurs de diffusion, les coefficients de diffusion, la longueur de charge d'espace, les nombres caractéristiques Enfin le programme nous donne les distributions des électrons et des excitons.

Le code de calcul a été validé par en comparant les résultats issus de notre code de calcul avec ceux trouvés par S.Ndiaye [12] qui a déterminé la densité des excitons dans un semi-conducteur de type en utilisant un système d'équations électrons- excitons linéaires sans présence de champ électrique.

II. Quelques résultats et commentaires

1. Conditions de calcul

Les résultats qui suivent ont été effectués à partir des expressions suivantes:

$$V_T = \frac{k_B T}{q} \quad ; \quad V_{bi} = V_T \cdot \ln \left(\frac{N_a N_d}{n_i^2} \right)$$

$$p_{no} = \frac{n_i^2}{N_d} \cdot 10^6 \quad ; \quad n_{po} = \frac{n_i^2}{N_a} \cdot 10^6$$

$$D_n = \frac{135010^{-4} \cdot V_T}{\sqrt{1 + \frac{81 \cdot N_a}{N_a + 3,210^{18}}}} \quad ; \quad D_p = \frac{48010^{-4} \cdot V_T}{\sqrt{1 + \frac{350 N_d}{N_d + 1,0510^{18}}}}$$

$$D_{ne} = 0,02586 \left[65 + \frac{1265}{1 + \left(\frac{N_a \cdot 10^{-16}}{8,5} \right)^{0,72}} \right] \cdot 10^{-4}$$

$$E_{\text{exNa}} = E_{X\infty} \cdot \left[1 - \left(\frac{Na}{n\text{Mott}} \right)^{0,5} \right]^2 \quad ; \quad \frac{E_{\text{exNa}}}{1,6 \cdot 10^{-19}} \cdot 10^3 = 16,74$$

$$W = \sqrt{\frac{2\epsilon}{q} \cdot \left(\frac{Na+Nd}{Na \cdot Nd} \right) \cdot 10^{-6} \cdot V_b} \quad ; \quad \tau_p = \frac{1210^{-6}}{1 + \frac{Nd}{5,010^{16}}}$$

$$\tau_n = \frac{1210^{-6}}{1 + \frac{Na}{5,010^{16}}} \quad ; \quad \tau_{\text{ex}} = \frac{\tau_{\text{exo}}}{\left(1 + \frac{Na}{7,010^{15}} \right)}$$

$$\alpha(\lambda) = 0.526367 - 1.14425/\lambda + 0.585368/\lambda^2 + 0.039958/\lambda^3$$

$$N(\lambda) = 5,0310^{18} \lambda P(\lambda) \quad ; \quad G_{x0} = f_x \cdot \alpha(\lambda) N(\lambda)$$

$$G_{\text{eho}} = f_e \cdot \alpha(\lambda) N(\lambda)$$

2. Quelques résultats

Puisque l'influence des excitons dans le fonctionnement d'une photopile est en partie due à la présence du coefficient de couplage exciton-électron dans les équations, nous allons donc mettre en évidence les effets du coefficient de liaison des excitons b (qui constitue un paramètre transversale) et du paramètre bs sur la distribution des porteurs. Nous regarderons les cas d'un couplage fort, moyen et faible. Dans tout ce qui suit nous avons choisi

$$N_A = 10^{+16} \text{cm}^{-3} \quad ; \quad N_d = 10^{+19} \text{cm}^{-3} \quad ; \quad n_i = 1,4510^{+10} \text{cm}^{-3}$$

La longueur de la cellule est $L = 200 \cdot 10^{-4} \text{cm}$ et celle de l'émetteur est fixée à $0,510^{-4} \text{cm}$. La longueur d'onde est $0,89 \mu\text{m}$ ce qui correspond à une irradiance spectrale de $0,2 \text{Wcm}^{-1} \mu\text{m}^{-1}$.

Dans ce qui suit nous avons imposé la même condition de Dirichlet à la face avant ($x=0$) pour les électrons. Des conditions de type Fourier sont par contre imposées à la face arrière et pour les électrons et pour les excitons.

Les tests que nous avons au préalable menés ont montré que le maillage $i_m = 201$ (nombre de nœuds total) et $i_w = 81$ (nombre de nœuds dans la zone de charge d'espace) constitue un bon compromis entre un temps de calcul acceptable et un volume de calcul raisonnable.

2.1 Cas d'un couplage fort

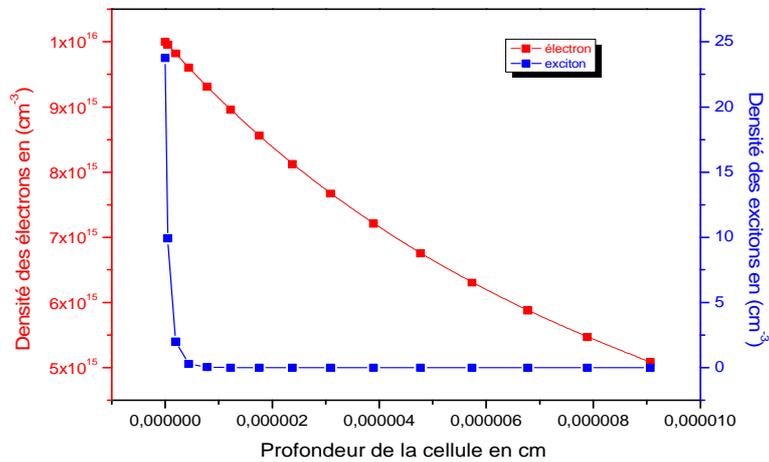


Figure 2-1: Distributions des électrons et des excitons en fonction de la profondeur de la cellule pour $b = 10^{-6}$; $b_s = 0$; $f_e = 1$ avec une recombinaison en surface pour les excitons $S_x = S_e = 10^8 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$

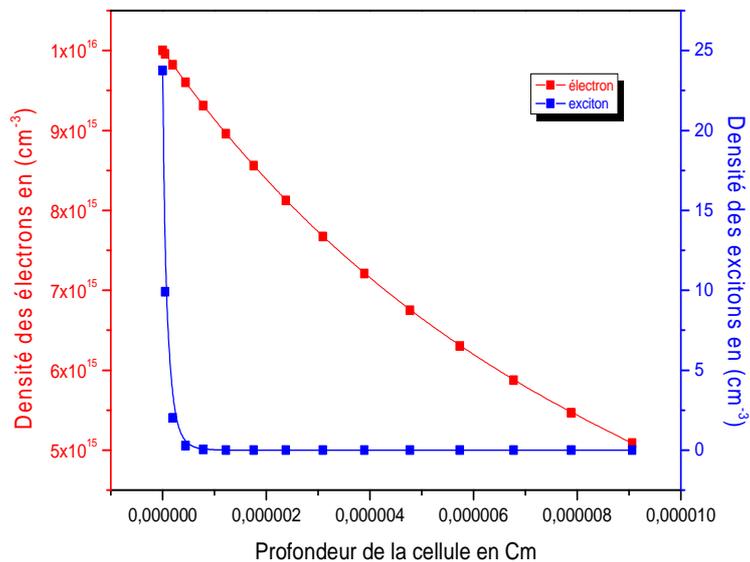


Figure 2-2: Distributions des électrons et des excitons en fonction de la profondeur de la cellule pour $b = 10^{-6}$; $b_s = 0$; $f_e = 0.5$ $S_x = S_e = 10^8 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$

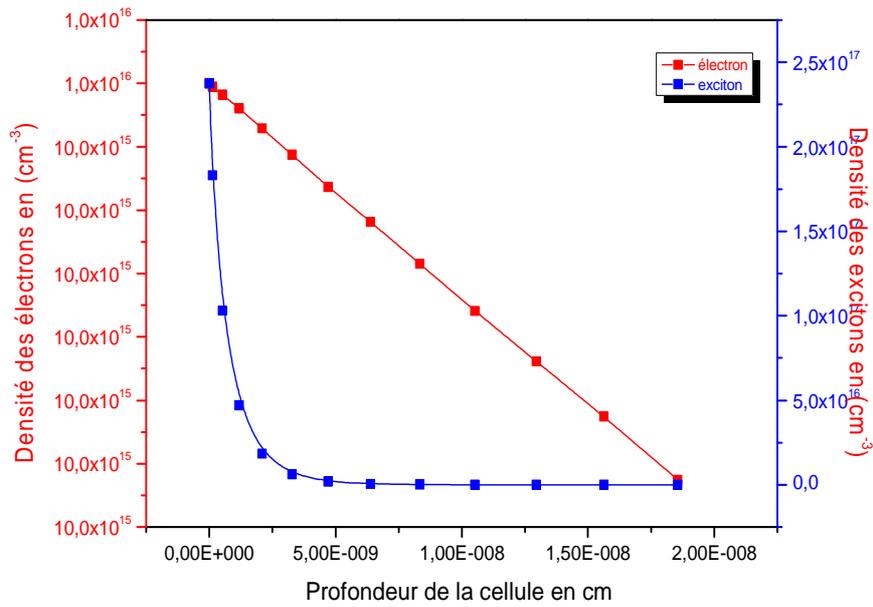


Figure 2-3: Distributions des électrons et des excitons en fonction de la profondeur de la cellule pour $b = 10^{-6}$; $b_s = 0$; $f_e = 1$ $n_x(0) = n_{x0}$

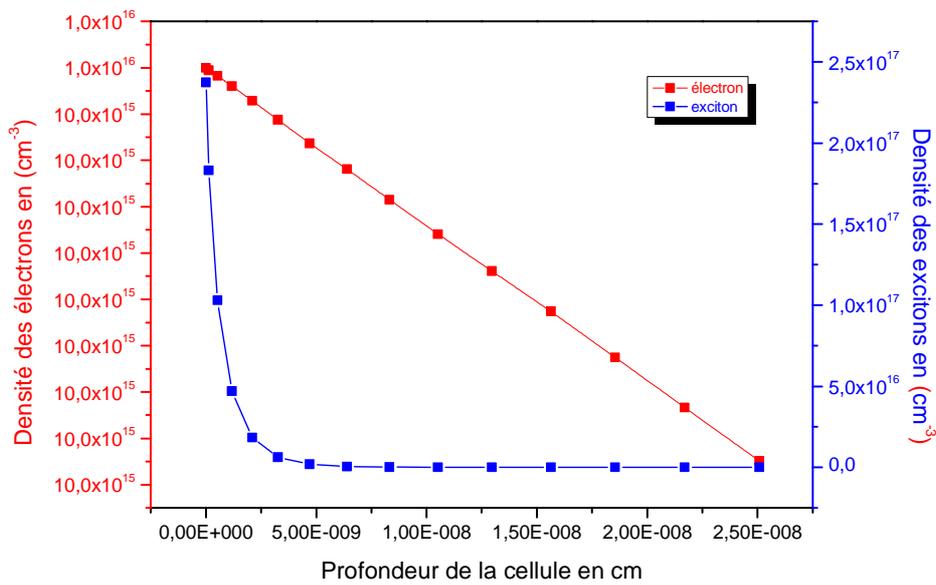


Figure 2-4: Distributions des électrons et des excitons en fonction de la profondeur de la cellule pour $b = 10^{-6}$; $b_s = 10^{-4}$; $f_e = 1$ $n_x(0) = n_{x0}$

2.2 Cas d'un couplage moyen

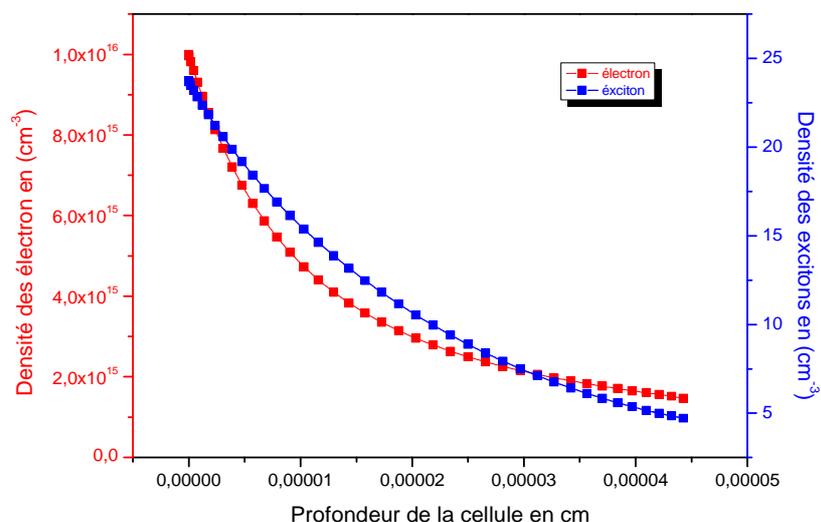


Figure 2-5: Distributions des électrons et des excitons en fonction de la profondeur de la cellule pour $b = 10^{-10}$; $b_s = 0$; $f_e = 1$ $S_x = S_e = 10^8 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$

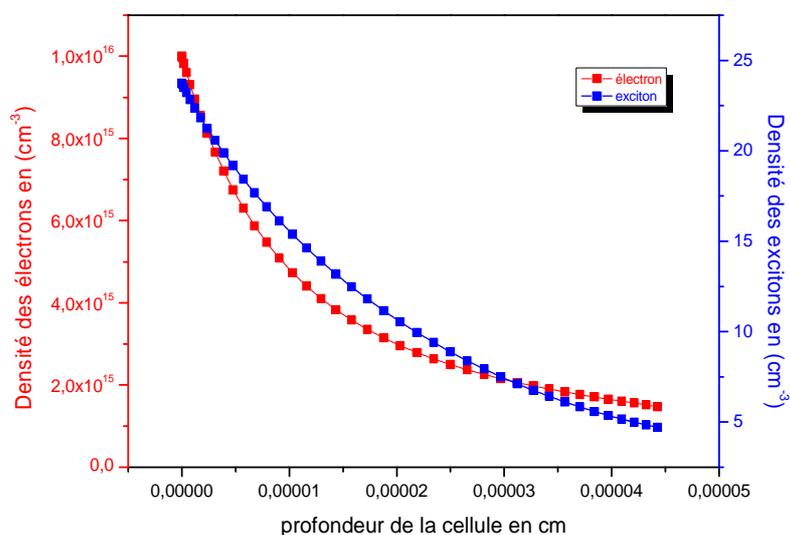


Figure 2-6: Distributions des électrons et des excitons en fonction de la profondeur de la cellule pour $b = 10^{-10}$; $b_s = 0$; $f_e = 0.5$ $S_x = S_e = 10^8 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$

2.3 Cas d'un couplage faible

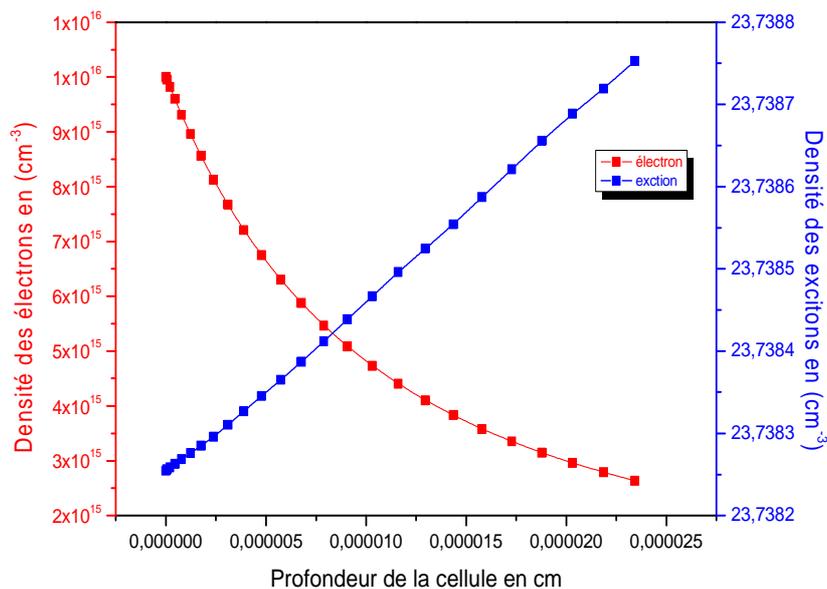


Figure 2-7: Distributions des électrons et des excitons en fonction de la profondeur de la cellule pour $b = 10^{-16}$; $b_s = 0$; $f_e = 1$ $S_x = S_e = 10^8 \text{ cm. s}^{-1}$

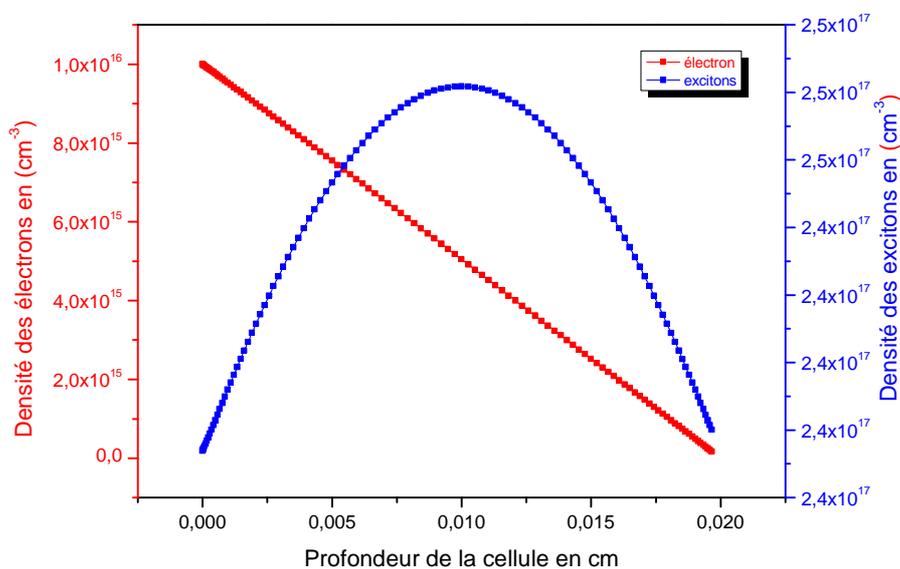


Figure 2-8: Distributions des électrons et des excitons en fonction de la profondeur de la cellule pour $b = 10^{-16}$; $b_s = 0$; $f_e = 1$ $n_x(0) = n_{x0}$

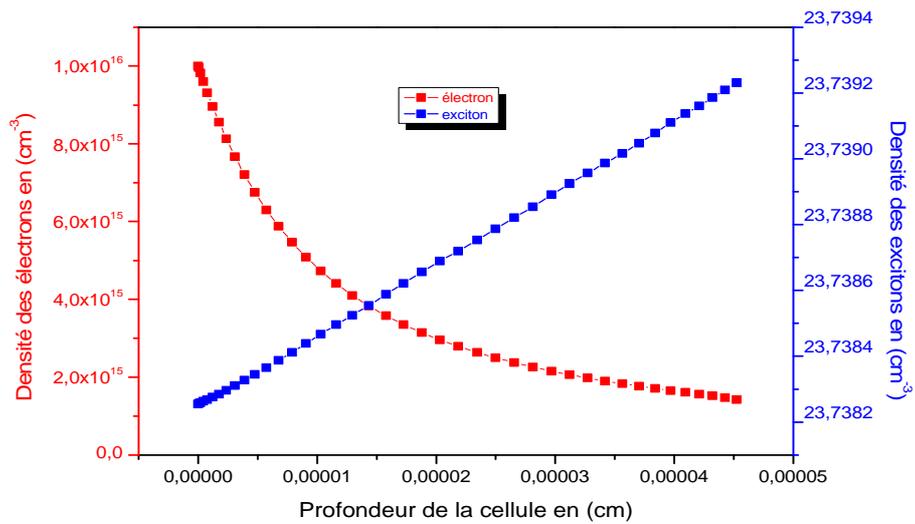


Figure 2-9: Distributions des électrons et des excitons en fonction de la profondeur de la cellule pour $b = 10^{-16}$; $b_s = 0$; $f_e = 0.5 S_x = S_e = 10^8 cm.s^{-1}$

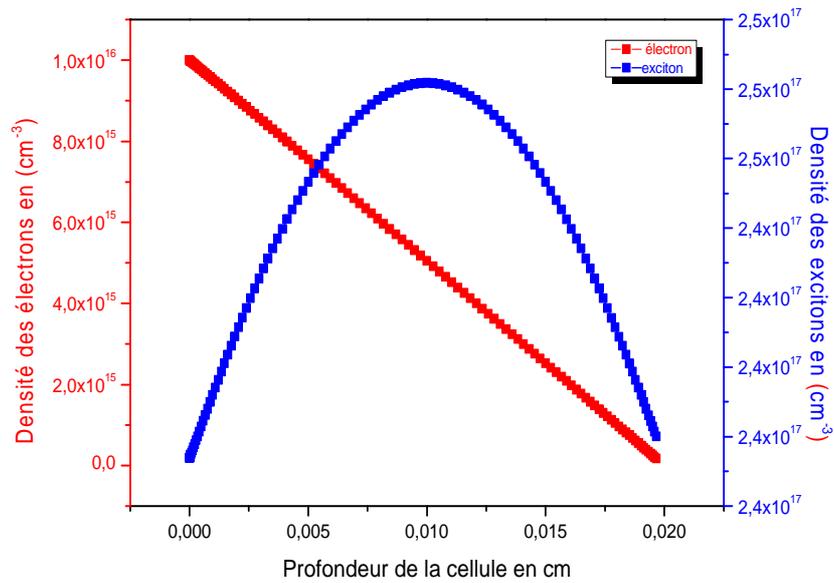


Figure 2-10: Distributions des électrons et des excitons en fonction de la profondeur de la cellule pour $b = 10^{-16}$; $b_s = 10^{-4}$; $f_e = 1$ $n_x(0) = n_{x0}$

Les courbes des figures montrent que les coefficients b et b_s , de même que la nature des conditions aux limites ont beaucoup d'importance sur les distributions des porteurs. En outre nous constatons que les plus importantes variations se font au niveau de la zone de déplétion. Il est à noter qu'avec les paramètres de calcul que nous avons utilisés le facteur d'absorption des photons (f_e) n'a pas beaucoup d'influences sur les distributions. Cela est en partie dû à la valeur assez élevée du coefficient d'absorption (**figures 2- 1 et 2- 2**)

Lorsque nous imposons des vitesses de recombinaison en surface élevées sur la face avant pour les excitons l'essentiel des transferts se font en particulier au niveau de la zone contigüe à la face avant ce qui entraîne de faibles valeurs de la densité des excitons comme nous pouvons le constater sur les courbes des **figures (2-1 ; 2-2 ; 2-5 ; 2-6; 2-7; 2-9)**.

Les courbes des **figures (2-3 ; 2-4 ; 2-8 ; 2-10)** montrent que le coefficient b a beaucoup d'influence surtout sur la distribution des excitons. Le couplage a pour effet d'augmenter les valeurs des densités des excitons et s'opposent aux phénomènes de recombinaison en surface.



CONCLUSION GENERALE

Dans ce travail nous avons modélisé mathématiquement et numériquement les distributions des excitons et des électrons dans une photopile. Le caractère fortement non linéaire des équations qui régissent le fonctionnement de notre cellule ainsi que le fort couplage des conditions aux limites font qu'une méthode numérique s'impose pour résoudre notre problème.

Pour discrétiser le domaine physique nous avons choisi un maillage à pas variables de type cosinus afin de minimiser les effets de discontinuités dus à la présence du champ électrique et de la petitesse de la zone de déplétion. Notre maillage tient compte aussi de la nature des conditions aux limites. Les équations du modèle mathématique sont intégrées numériquement en utilisant la méthode de volumes finis qui est une méthode très performante car elle conserve les continuités des flux locaux et globaux.

Les coefficients issus de la discrétisation sont déterminés grâce à la loi de puissance de Patankar qui assure une forte stabilité aux schémas.

Après avoir rendu les systèmes matriciels obtenus sous forme tri-diagonale, nous les avons résolus en utilisant l'algorithme de Thomas combiné à une méthode d'itération de relaxation ligne par ligne.

Le code de calcul que nous avons mis au point est fiable et accessible. Elle n'est pas «cloudée» et donc on peut suivre le déroulement des opérations et contrôler les calculs. Son exécution est facile et n'exige aucune compétence avérée ni en calcul numérique ni en langage informatique.

Cet outil de base est cependant à étendre en y incluant par exemple des routines de calcul de l'irradiance spectrale, des réponses spectrales, des photo-courants. Nous pouvons aussi le modifier à l'avenir en tenant compte de certains paramètres ignorés ou négligés. Nonobstant la prise en considération de la concentration des trous dans toute la cellule et d'un champ électrique donné dans la ZCE, notre modèle n'est toujours pas général, mais il couvre la plupart des vraies situations de semi-conducteur.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] **A. Hangleiter**: Nonradiative recombination via deep impurity levels in Silicon:Experiment, **Rev. Phys. B** 35, 9149-9161 (1987).
- [2] **A. Hangleiter**: Nonradiative recombination via deep impurity levels in semiconductors: Exitonic Auger mechanism **Rev. Phys. B** 37, 2594- 2604(1988).
- [3] **R. Hacker, A. Hangleiter**: Intrinsic upper limits of the carrier life time in silicon **J.Phys. Appl.** 75, 7570- 7573 (1994)
- [4] **P.P. Altermatt, J. Schmidt, G. Heiser, A.G. Aberle**: Assessment and parameterization of coulomb-enhanced auger recombination coefficient in lowly injected cristalline **J.Phys.Appl.** 82, 4938- 4940 (1997)
- [5] **D.E. Kane, R.M. Swanson**: The effects of excitons on apparent band gap narrowing and transport in semiconductors, **J. Appl. Phys.** 73, 1193-1197 (1993)
- [6] **M. Green**: Proc. 26th IEEE Photovoltaic Specialists Conference (Anaheim,CA, 1997), p. 51, IEEE, New-York, 1997.
- [7] **M. Green**: Proceedings of the 2nd World Conference on Photovoltaic Energy Conversion (Wien, O Sterreich, July 1998), p. 74, JRC, European Commission, 1998.
- [8] **R. Corkish, D. Chan, M. Green**: Excitons in silicon cells diodes and solar: A three-particle theory, **J. Appl. Phys.** 79 195 -203 (1996).
- [9] **Y. Zhang, A. Mascarenhas, S. Deb**: Effects of excitons in solar cells **J. Appl. Phys.** 84 3966 – 3971 3966 (1998).
- [10] **M. Burgelman, B. Minnaert**: Including excitons in semiconductor solar cell modeling, **Thin Solid Films** 511 – 512, 214 – 218 (2006)
- [11] **S.V.Patankar**:“*Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*”, **Hemisphere Publishing Corporation, McGraw-Hill Book Company**, 1980.
- [12] **S.NDIAYE** : Effet des excitons sur la réponse spectrale d’une cellule solaire au silicium monocristallin sous éclairnement monochromatique, **mémoire de master** (30-juillet-2011)

**Sujet: «ELABORATION D'UN CODE DE CALCUL POUR LA
DETERMINATION DES CONCENTRATIONS DES EXCITONS ET DES
ELECTRONS DANS UNE PHOTOPILE AU Si»**

Mémoire présenté par

OUSMANE BAKHOUM

**Pour obtenir le DIPLOME DE MASTER EN PHYSIQUE ET APPLICATION
SPECIALITES: Energie Solaire Matériaux et systèmes (SOLMATS)**

Président:	Joseph SARR	Professeur titulaire	FST/UCAD
Membres:	Bassirou BA	Professeur titulaire	FST/UCAD
	Mamadou Lamine SOW	Maitre de conférences	FST/UCAD
	Cheikh MBOW	Maitre-assistant	FST/UCAD

RESUME:

Nous nous proposons de mettre au point un code de calcul stable et viable permettant d'étudier l'influence de l'incorporation des excitons- longtemps négligée- dans une cellule solaire(Si) de type n^+p . Le modèle mathématique décrivant les comportements des densités des électrons et des excitons est constitué de deux équations différentielles fortement couplées entre elles et aussi couplées avec leurs conditions aux limites. Ces équations sont alors approchées, après discrétisation par la méthode de volume de contrôle de Patankar, par deux systèmes algébriques non linéaires. Elles sont résolues en utilisant l'algorithme de Thomas combiné avec un schéma itératif de relaxation ligne par ligne.

Après avoir validé le code de calcul nous avons déterminé les distributions des densités des électrons et des excitons en fonction de certains paramètres géométriques, physiques et des propriétés intrinsèques des porteurs.

Mots clés: **Excitons, Electrons, Coefficient de couplage, Adimensionnalisation, Code, Algorithme, Numérique,**

