Modélisation numérique des dispositifs à semi-conducteurs

La modélisation numérique est un moyen performant d'analyse et de compréhension des phénomènes physiques se produisant dans un composant à semi-conducteurs. Elle consiste à concevoir des modèles physiques précis décrivant les mécanismes appropriés qui régissent les phénomènes de transport des porteurs de charges (électrons – trous) dans les dispositifs à semiconducteurs (modélisation) , et en même temps, à développer des procédures numériques stables et efficaces (simulation numérique) qui permettent de calculer des estimations quantitativement précises des paramètres et des caractéristiques électroniques principales.

Les phénomènes de transport dans un composant à semiconducteurs sont décrits par des modèles et des équations physiques.

Selon le modèle de dérive- diffusion; l’ensemble des équations phénoménologiques décrivant le processus de transport dans un dispositif à semi-conducteur contient généralement, <u>l’équation de Poisson , les équations de continuité des électrons et des trous libres , et les équations des densités de courants des électrons et des trous.</u>

Dans cette étude, nous présentons la méthode numérique pour étudier <u>les propriétés électriques d’une cellule solaire à base de semiconducteur.</u>

Nous écrivons l’ensemble des équations décrivant le processus de transport dans une cellule solaire,

Nous définissons les conditions aux limites pour chaque inconnu. Nous normalisons les variables. Puis, nous introduisons une méthode itérative pour calculer numériquement les solutions. L’algorithme de résolution du système des équations différentielles est basé sur la méthode de Newton. La discrétisation du domaine d'étude des équations différentielles est basée sur la méthode de différences finies.

Détermination du dispositif à étudier
تحديد الجهاز المراد دراسته

↓

Détermination du cas de l’étude (tridimensionnelle, bidimensionnelle ou unidimensionelle)
تحديد حالة الدراسة (ثلاثية البعد ، ثنائية البعد أو أحادية البعد)

↓

Ecrire l’ensemble des équations de transport appropriées
كتابة جملة معادلات النقل المناسبة

↓

Ecrire les conditions aux limites et les conditions initiales
كتابة الشروط الحدية و الابتدائية الموافقة لمعادلات النقل

↓

Résoudre l’ensemble des équations de transport
حل جملة معادلات النقل

↙ ↘

Approche numérique مقاربة رقمية	Approche analytique مقاربة تحليلية
↓	↓
Calcul des paramètres externes et internes حساب الوسائط الخارجية و الداخلية الخصائص J-V ، تراكيز حاملات الشحنة ، الكمون ، الحقل	Calcul des paramètres externes et internes حساب الوسائط الخارجية و الداخلية الخصائص J-V ، تراكيز حاملات الشحنة ، الكمون ، الحقل

Equations de transport dans une cellule solaire à jonction (np):

le modèle classique de dérive-diffusion (DD) de transport, exprime en plus de l'équation de Poisson pour le potentiel, la conservation des densités des électrons et des trous. Ce modèle peut être obtenu à partir des équations de Maxwell.

1. **Équation de Poisson:** L'équation de Poisson décrit des phénomènes de nature électrostatique, elle permet de relier le potentiel électrique Ψ avec la densité de charge ρ. Elle peut être déduite de l'une des équations du Maxwell, $\nabla.D = \rho$. à partir d'une équation caractérisant le comportement électrique du matériel, ε E= D , et de fait que $E = -\nabla\psi$, L'équation de poisson s'écrit:

$$\nabla.(\nabla\psi) = -\frac{\rho}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}$$

ψ **est le potentiel électrique (V).** ρ **la densité de charge d'espace (**$\mathrm{C\,cm^{-3}}$**).**

L'intégration de cette équation permet de calculer la variation du potentiel dans un semi-conducteur à partir de la charge d'espace.

La charge d'espace est calculée en tenant compte de toutes les charges qui existent en un point du semi-conducteur, c'est-à-dire d'une part des charges mobiles que sont les électrons et les trous avec des concentrations n et p, respectivement, et d'autre part des charges fixes qui peuvent être localisées sur des accepteurs ou donneurs ionisés, avec des concentrations Na^- ou Nd^+, ou sur des centres profonds. En l'absence de centres profonds ionisés et à une température ambiante, l'équation de Poisson s'écrit simplement :

$$\nabla^2\psi = -\frac{q}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}(p - n + N_d - N_a)$$

2. Les équations de continuité:

Les équations de continuités régissent la condition d'équilibre dynamique des porteurs dans le semi-conducteur. Dans un barreau semi-conducteur parcouru par un courant, considérons un élément infinitésimal de volume. La diminution de la quantité de porteurs par unité de temps dans le volume est due à : (i) la différence locale entre le flux des porteurs qui entrent la volume et de ceux qui en sortent, et (ii) la différence entre les porteurs qui se recombinent et qui génèrent.

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} div\, J_n - U_n + G$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} div\, J_p - U_p + G$$

t **est le temps (s),** $\varepsilon_r \varepsilon_0$ **la permittivité du semi-conducteur (**$\mathrm{F\,cm^{-1}}$**),**

G **le taux de génération optique (**$\mathrm{cm^{-3}s^{-1}}$**).**U_n **et** U_p **les taux nets de recombinaison des électrons et rous (**$\mathrm{cm^{-3}s^{-1}}$**) respectivement.**

n **et** ***p*** **les densités des électrons et des trous libres (**$\mathrm{cm^{-3}}$**).**

$\frac{\partial n}{\partial t}$ **et** $\frac{\partial p}{\partial t}$ **sont les taux de variation des densités des électrons et des trous libres avec le temps (**$\mathrm{cm^{-3}s^{-1}}$**).**

3. Les équations du courant:

Les courants dans le semi-conducteur résultent de déplacement des porteurs de charge, électrons et trous, sous l'action d'une force. L'origine de la force peut être un champs électrique ou un gradient de concentration. Dans le premier cas, le courant est dit de conduction, dans le second il est dit de diffusion. La forme simple de ces équations, connue

sous le nom 'modèle de dérive-diffusion', est :

$$J_n = q\, n\, \mu_n\, E + qD_n\ grad\, n$$

$$J_p = q\, p\, \mu_p\, E - qD_p\ grad\, p$$

J_n **et** J_p **les densités de courants des électrons et des trous (**$\mathrm{A\,cm^{-2}}$**).**

D_n **et** D_p **sont les coefficients de diffusion des électrons et des trous (**$\mathrm{cm^2\,s^{-1}}$**).**

Ils sont exprimés en fonction de $\mu_{n,p}$ **selon la relation d'Einstein** $D_{n,p} = \dfrac{k_B T}{q}\mu_{n,p}$ **.**

μ_n **et** μ_p **sont les mobilités des électrons et des trous (**$\mathrm{cm^2\,V^{-1}s^{-1}}$**).**

en appliquant E = - $\nabla\psi$, les courants d'électrons et de trous peuvent s'écrire sous la forme:

$$J_n = q\mu_n\, (-\ n\ grad\ \psi + \frac{KT}{q}\ grad\ n)$$

$$J_p = q\ \mu_p(-\, p\ grad\ \psi - \frac{KT}{q}\ grad\ p)$$

Pour le cas stationnaire, en considérant la cellule comme un dispositif unidimensionnel, ces équations s'écrivent comme suit

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon_r \varepsilon_o}$$

$$\frac{1}{q}\frac{\mathrm{d}J_n(x)}{\mathrm{d}x} - U_R(x) + G(x) = 0$$

$$-\frac{1}{q}\frac{\mathrm{d}J_p(x)}{\mathrm{d}x} - U_R(x) + G(x) = 0$$

$$J_n(x) = -q\mu_n n(x)\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} + k_B T \mu_n \frac{\mathrm{d}n(x)}{\mathrm{d}x}$$

$$J_p(x) = -q\mu_p p(x)\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} - k_B T \mu_p \frac{\mathrm{d}p(x)}{\mathrm{d}x}$$

si le matériau semi-conducteur contient des défauts avec

$n_t(x)$ et $p_t(x)$ les densités de charges (cm^{-3}) négatives et positives dans les états des défauts :

La densité de charge $\rho(x)$ peut s'écrire:

$$\rho(x) = q(p(x) - n(x) + p_t(x) - n_t(x) + N_{AD}(x))$$

Avec $N_{AD}(x)$ la densité du dopage le long de la cellule. Pour une cellule à jonction n-p abrupte ::

$$N_{AD}(x) = \begin{cases} +Nd \text{ au région } n \\ -Na \text{ au région } p \end{cases}$$

En cas d'illumination, le taux de génération optique $G(x)$ dans les équations précédentes est donné par la loi exponentielle décroissante depuis la région de photo-génération.

$G(\lambda,x) = \alpha(\lambda).\phi(x) \exp(-\alpha(\lambda).x)$

Dans l'état stationnaire, le taux de recombinaison total des électrons est égale à celui des trous. On peut définir le taux de recombinaison total ; tel que

$U_n (x)=U_p (x)=U_R (x)$

L'étude théorique de la cellule solaire est réalisée généralement par deux approches :

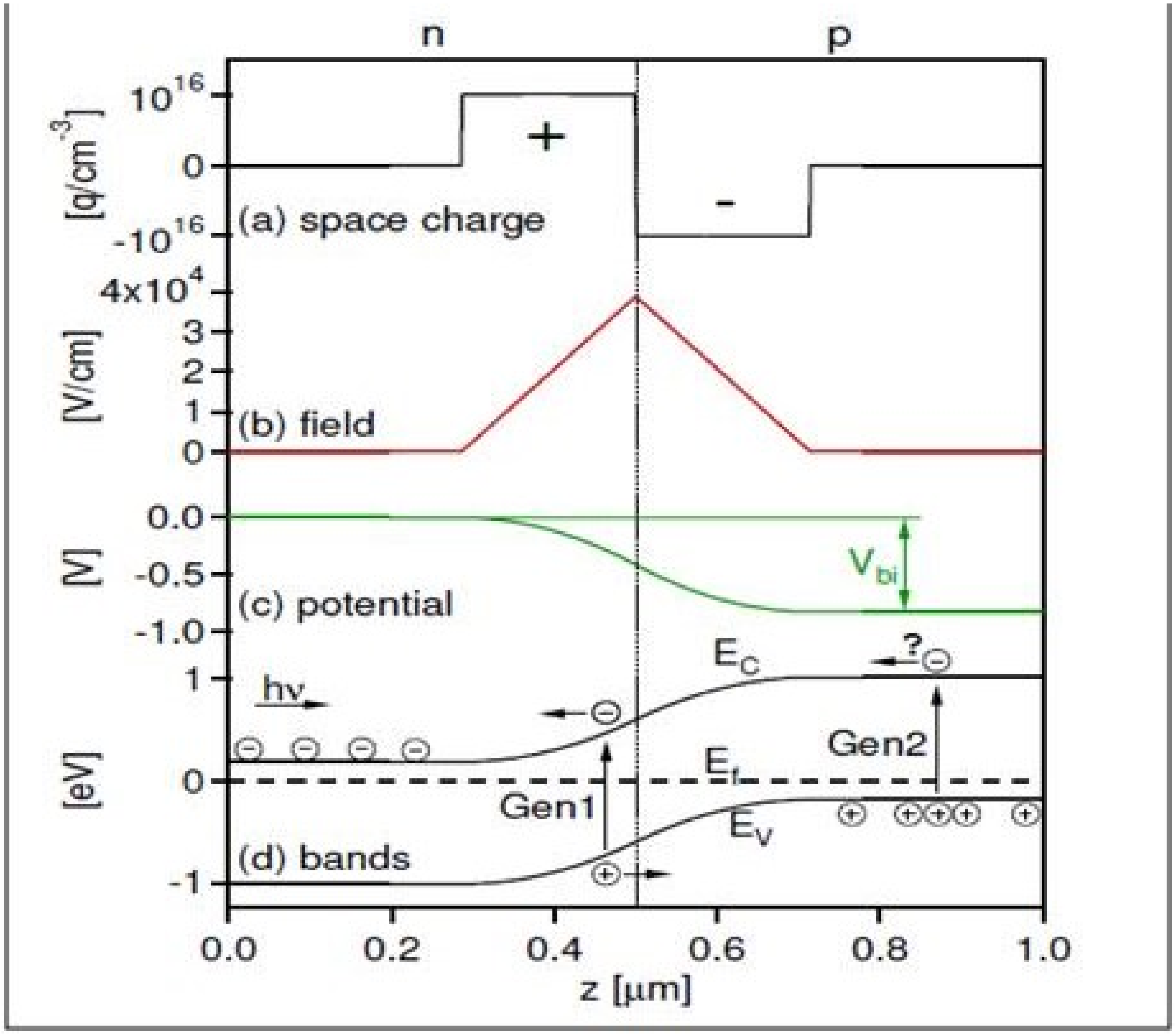
1. Approche analytique :

nous considérons des simplifications et des approximations permettant de résoudre les équations de transport qui décrivent le comportement de la cellule analytiquement.

2.Approche numérique :

Renoncer à toutes les simplifications et les hypothèses conduisant à la solution analytique nécessite des approches numériques pour résoudre les équations de transport.

Formation de la jonction np dans l'approximation analytique . (a) la distribution de la charge d'espace due aux dopants ionisés fixes, (b) le champ électrique obtenue par l'intégral de l'équation de Poisson, (c) un 2ème intégral donne le potentiel électrostatique. La tension interne Vbi décrit la différence de potentiel entre le coté n et p de la jonction à l'équilibre. La collection des porteurs photo-générés nécessite que la tension appliquée V < Vbi et, par conséquent, Vbi est une limite supérieure de la tension en circuit ouvert d'une cellule solaire; (d) le minimum de la bande de conduction Ec, et le maximum de la bande de valence Ev, et le niveau de Fermi à l'équilibre. On présente, schématiquement, la génération d'une paire électron-trou à l'intérieur (Gen1) et à l'extérieur (Gen2) de la SCR



Modèle de la recombinaison:

Le taux de recombinaison net à travers un piège $E= E_T$ dans le gap d'énergie, appelé également la recombinaison Shockley –Read –Hall est donnée par :

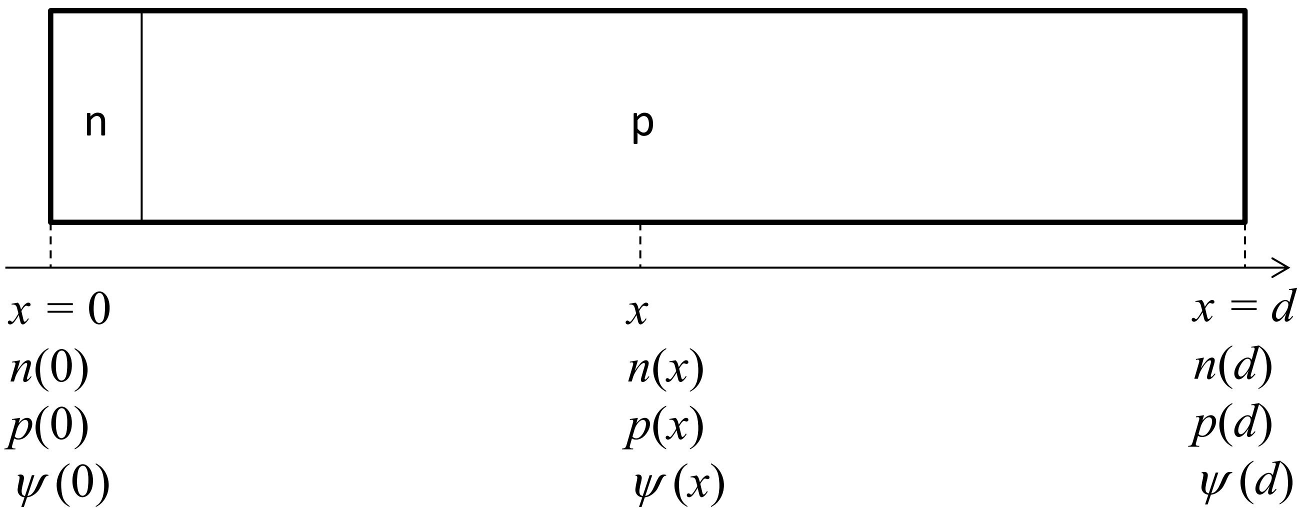
$$R_{srh}=\frac{n\ .\ p-n_i^2}{\tau_{srh,n}\left(p+n_i\ e^{(E_i-E_T)\ /KT}\right)+\tau_{srh,p}\left(n+n_i\ e^{(E_T-E_i)\ /KT}\right)}$$

Ou la durée de vie des porteurs est donnée par [83]:

$$\tau_{srh} = \frac{1}{\sigma\vartheta_{th}N_T}$$

Ou σ est la section efficace de capture, ϑ_{th} est la vitesse thermique des porteurs libres, et N_T la densité des pièges. E_i niveau de Fermi intrinsèque, n_i concentration intrinsèque. le coefficient de capture $C= \sigma\vartheta_{th}$

Conditions aux limites:



Les trois équations qui gouvernent le transport dans la jonction np (équations de Poisson et de continuité) doivent être vérifiées à chaque point du dispositif et la solution de ces équations implique la détermination ou le calcul des variables $n(x),\ p(x)\ et\ \psi(x)$ à chaque point x ce qui définit complètement le système à chaque point x du dispositif.

Les équations gouvernant le transport dans la cellule sont non linéaires et sont couplées, elles ne peuvent pas être résolues analytiquement. Donc des méthodes numériques doivent être utilisées comme la méthode de Newton. Elle est utilisée pour résoudre numériquement les équations résultantes. Comme toute analyse mathématique, des conditions aux limites doivent être imposées sur l’ensemble des équations. Pour être spécifique, les solutions des équations (de Poisson et de continuité) doivent satisfaire les conditions aux limites suivantes :