

République Algérienne Démocratique Et Populaire

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université Ferhat Abbas - Sétif 1
Institut d'Optique et Mécanique de Précision

THESE

Présentée à l'Institut d'Optique et Mécanique de Précision
pour l'obtention du diplôme de

Doctorat en Sciences

Option : Optique et Mécanique de Précision

Par :

BECHANE LEILA

THÈME :

**Etude de l'amélioration des propriétés de matériaux semi-conducteurs
pour des applications comme cellules photovoltaïques**

Soutenue le:13/01/2022

Devant le jury composé de :

Mr. Guessas Houcine	Prof.	Université de Sétif1	Président
Mr. Loucif Kamel	Prof.	Université de Sétif 1	Encadreur
Mr. Bouzid Abderrazak	Prof.	Université de Bordj Bou Arreridj	Co-Encadreur
Mr. Doghman Abdelaziz	Prof.	Université de Badji Mokhtar Annaba	Examineur
M ^{me} . Mahdjoub Zahia	Prof.	Université de Badji Mokhtar Annaba	Examineur
M ^{me} . Mezrag fadila	Prof.	Université de M'sila	Examineur

REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier vivement mes directeurs de thèse, Monsieur Loucif Kamal, Professeur à l'université de sétif1 et Bouzid abderrazak Professeur à l'université de Bordj Bou Arreridj pour m'avoir donné l'opportunité de réaliser cette thèse, pour leurs encouragements, leurs disponibilités et leurs intentions.

J'adresse mes sincères remerciements à Monsieur le professeur Bouarissa Nadir, de l'université de M'sila, de m'avoir accordé ses judicieux conseils, qui ont contribué à perfectionner ma publication.

Je tiens à témoigner toute ma reconnaissance à :

Monsieur Guessas Houcine, Professeur à l'Université de sétif1, d'avoir accepté de présider mon jury de thèse.

Madame Mahdjoub Zahia Professeur à l'Université Badji Mokhtar de Annaba, Madame Mazrag Fadila, Professeur à l'Université de M'sila et Monsieur Doghman Abdelaziz, Professeur à l'Université Badji Mokhtar de Annaba, d'avoir accepté d'examiner mon travail de thèse.

Un grand merci également va à Dr Wahiba Slimani pour son soutien technique et moral et Professeur Salima Saib pour son accueil au sein de son laboratoire de Physique des matériaux et ses applications à M'sila.

Enfin, je remercie ma famille et plus particulièrement mon père, ma mère, mon mari mes frères, mes enfants et tous mes amis.

Sommaire

Introduction générale.....	1
Chapitre I : Généralités sur les cellules photovoltaïques	
I.1. Introduction.....	4
I.2. Le principe de la conversion Photovoltaïque	4
I.2.1. Historique.....	4
I.2.2. Développement du photovoltaïque dans le monde.....	4
I.2.3. Développement du photovoltaïque en Algérie.....	7
I. 3. Notion préliminaire sur le rayonnement solaire	8
I. 4. L'interaction rayonnement/semi-conducteur.....	9
I. 5. Fonctionnement et caractéristiques de sortie d'une cellule photo- voltaïque	11
I. 6. Facteurs limitant le rendement.....	13
I.6.1. Pertes engendrées par l'utilisation du silicium.....	13
I.6.2. Les pertes technologiques.....	14
I.7. Schéma électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque.....	15
I.8. Les différentes filières photovoltaïques.....	17
I.8.1. La filière silicium cristallin.....	18
I.8.1.1. Le silicium monocristallin	18
I.8.1.2. Le silicium multi cristallin.....	18
I.8.2. La filière couches minces.....	18
I.8.2.1. Le silicium amorphe (a-Si :H).....	19
I.8.2.2. Le tellure de cadmium (CdTe).....	20
I.8.2.3. Le di séléniure de cuivre et indium (CIS ou CIGS).....	21
I.8.3. La filière des cellules organiques.....	21
I.8.4. La filière des pérovskites.....	22
I.8.5. Cellules multi-jonctions à haut rendement.....	23
I.9. Références.....	23
Chapitre II : Propriétés des matériaux photovoltaïques des cellules solaires en couches minces	
II.1 Introduction sur les matériaux photovoltaïques.....	27
II.2 Le silicium amorphe (a-Si :H).....	28
II.2.1. Description générale du matériau.....	28
II.2.2. Propriétés électriques du silicium amorphe.....	30
II.2.3. Propriétés optiques du silicium amorphe.....	30
II.2.4. Dopage du silicium amorphe.....	31
II.2.5. Avantages et désavantages	32
II.3. Le tellure de cadmium (CdTe).....	32
II.3.1. Description générale du matériau.....	32
II.3.2. Propriétés électroniques tellure de cadmium.....	33
II.3.3. Propriétés optiques de tellure de cadmium.....	34
II.3.4. Dopage de tellure de cadmium.....	34
II.4. Le sulfure de cadmium (CdS).....	35
II.4.1. Description général du matériau	35

II.4.2. Propriétés électriques de sulfure de cadmium.....	35
II.4.3. Propriétés optiques de sulfure de cadmium.....	36
II.5. L'oxyde de zinc (ZnO).....	37
II.5.1. Description général du matériau.....	37
II.5.2. Propriétés électriques de L'oxyde de zinc.....	39
II.5.3. Propriétés optiques de L'oxyde de zinc.....	41
II.5.4. Dopage de L'oxyde de zinc.....	42
II.6. Références	43

Chapitre III : modèle de simulation (AMPS-1D)

III.1. Introduction.....	48
III.2. Présentation de modèle électrique du simulateur AMPS-1D.....	49
III.2.1. Equation de Poisson et densités de courants.....	49
III.2.2. Densité de porteurs libres.....	51
III.2.2.A. A l'équilibre thermodynamique.....	51
III.2.2.B. Hors équilibre thermodynamique.....	53
III.2.3. la densité de dopage effective.....	54
III.2.4. Etats dans la bande interdite.....	54
III.2.4.A. Etats de queue de bande.....	55
III.2.4.B. Etats du centre du gap.....	56
III.2.4.B.1. Pour la distribution en U.....	56
III.2.4.B.2. Pour la distribution Gaussienne.....	56
III.2.5 Probabilité de la fonction d'occupation.....	57
III.2.5.A. A l'équilibre thermodynamique.....	57
III.2.5.B. Hors équilibre thermodynamique.....	58
III.2.6 Densité de charges dans les états localisés.....	60
III.2.6.A. A l'équilibre thermodynamique.....	60
III.2.6.B. Hors équilibre thermodynamique.....	61
III.2.7. Taux de recombinaison dans les états localisés.....	61
III.2.8. Densités de courants.....	62
III.3. Modèle optique.....	62
III.4. Méthode numérique de résolution.....	63
III.5. Aperçu sur le fonctionnement de logiciel AMPS-1D.....	65
III.5.1. Paramètres qui s'appliquent au dispositif entier.....	66
III.5.2. Paramètres qui s'appliquent à une région particulière.....	67
III.5.3. Paramètres qui définissent le spectre d'illumination.....	67
III.5.4. Courbes de Sortie de la cellule simulée par l'AMPS-1D.....	69
III.6. Références.....	69

Chapitre IV : Simulation et optimisation des cellules solaires en technologie couches minces.

IV. Introduction.....	71
IV.1. Simulation et optimisation d'une cellule solaire p-i-n à simple jonction.....	71
à base de (a-Si :H)	
IV.1.1. Description de la structure.....	73
IV.1.2. Paramètres d'entrées et Simulation de la structure.....	74
IV.1.2. A. Paramètres d'entrées électriques.....	74
IV.1.2. B. Paramètres d'entrées optiques.....	74

Sommaire

IV.1.3. Résultats de simulation et discussions.....	76
IV.1.3.1. Caractéristiques courant tension de la cellule p-i-n en fonction de l'épaisseur de la couche intrinsèque.....	76
IV.1.3.2. L'effet de l'épaisseur de la couche active (a-Si :H) et la densité des états (DOS) sur les performances de la cellule (p-i-n).....	76
IV.1.3.3. Optimisation du gap de mobilité de la couche active de la cellule solaire p-i-n à base de (a-Si :H).....	78
IV.1.3.4. Rendement quantique en fonction de l'épaisseur de la couche intrinsèque.....	80
IV.2. Simulation et optimisation d'une cellule solaire binaire à hétérojonction.....	82
IV.2.1. Description de la structure.....	83
IV.2.2. Résultats de simulation et discussions.....	86
IV.2.2.1. L'effet de l'épaisseur de la couche absorbante (CdTe) sur les performances des trois cellules.....	87
IV.2.2.2. L'effet de l'épaisseur de la couche (CdS) sur les performances des Cellules.....	90
IV.2.2.3. L'effet de l'épaisseur de la couche (ZnO) sur les performances des trois cellules.....	93
IV.2.2.4. L'effet de l'épaisseur de la couche active (CdTe) en fonction e la densité des états (DOS) sur les performances de la cellule (CdS/CdTe).	95
IV.3. Conclusion.....	97
IV.4. Références.....	98
Conclusion générale.....	103

Liste des figures :

Figure I.1 : Capacité photovoltaïque globale cumulée à l'horizon 2030.	5
Figure I.2 : Approvisionnement énergétique primaire total dans le monde en 2014.	5
Figure I.3 : Part de la production des différentes énergies renouvelables.	6
Figure I.4 : Taux de croissance annuel d'approvisionnement énergétique mondial de 1990 à 2014.	6
Figure I.5 : Répartition des capacités à installer par filière durant (2015-2030) en algérie.	7
Figure I.6 : Phases du programme algérien des énergies renouvelables.	7
Figure I.7 : Représentation graphique des spectres AM0 et AM1.5 d'après. Le domaine spectral utile aux cellules en silicium est mis en évidence.	8
Figure I.8 : Moyenne annuelle de l'irradiation Solaire globale reçue sur un Plan incliné à la Latitude du lieu en Algérie.	9
Figure I.9 : Transitions bande à bande dans un semi-conducteur (a) à bande interdite directe Et (b) À bande indirecte.	10
Figure I.10 : Illustration du fonctionnement d'une cellule photovoltaïque conventionnelle.	12
Figure I.11 : Schéma électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque.	15
Figure I.12 : Évolution des records de rendements de chaque filière de cellules photovoltaïques.	17
Figure I.13 : Schémas des configurations (a) p-i-n et (b) n-i-p d'une cellule solaire.	19
Figure I.14 : Structure hybride de la pérovskite.	22
Figure II.1 : Variation du rendement en fonction de la largeur de bande interdite.	27
Figure II.2 : Représentation du silicium amorphe hydrogéné. Les atomes de silicium sont représentés en noir et les atomes d'hydrogène en blanc.	29
Figure II.3 : Répartition de la densité d'états d'énergie dans le silicium amorphe hydrogéné.	29
Figure II.4 : Coefficients d'absorption du silicium amorphe et du silicium cristallin En fonction de l'énergie.	30
Figure II.5 : Représentation du tellure de cadmium (CdTe). Les atomes de cadmium Cd Sont représentés en noir et les atomes de tellure en rouge.	33

Figure II.6 : Représentation schématique des diagrammes d'énergie dans les cas d'un matériau intrinsèque (a), dopé n (b) et dopé p (c).	34
Figure II.7 : Structure du composé (CdS). (a) zinc blende (b) (Wurtzite).	35
Figure II.8 : Structure cristallographique du (ZnO) (Wurtzite).	37
Figure II.9 : Structure cristalline de (ZnO) en phase a) (NaCl) ; b) Zinc blende ; et c) wurtzite , d'après Ozgur et al.	39
Figure II.10: Structure de bande du (ZnO) (la référence zéro correspond au maximum d'énergie de la bande de valence).	40
Figure II.11: Dispersion des indices de réfraction $n_0(a)$, $n_e(b)$.	41
Figure III.1: Diagramme des bandes d'énergies. Pour une structure p-i-n à l'équilibre thermodynamique.	52
Figure III.2 : Diagramme des bandes d'énergies pour une structure p-i-n, hors équilibre thermodynamique.	53
Figure III.3 : Distribution des états localisés dans le gap utilisée dans le programme. (a) Modèle en U. (b) Distribution Gaussienne.	55
Figure III.4 : Différentes fenêtres pour introduire les paramètres.	66
Figure III.5 : Boîte de dialogue pour définir la structure à simuler et configurer les paramètres de ses différentes couches.	67
Figure III.6 : Boîte de dialogue des paramètres d'illumination et d'absorption.	68
Figure III.7 : Courbes de Sortie de la cellule simulée par l'AMPS-1D.	69
Figure IV.1 : Représentation schématique de la cellule solaire simple p-i-n à base de silicium amorphe.	74
Figure IV.2 : Caractéristiques $J(V)$ de la cellule (p-i-n) à simple jonction à base de (a-Si :H) en conditions d'illumination AM1.5G simulée à l'aide l'AMPS-1D.	76
Figure IV.3 : Les Caractéristiques (J_{SC} , E_{ff} , FF , V_{OC}) de la cellule (p-i-n) à simple jonction à base de (a-Si :H) en conditions d'illumination AM1.5G simulée à l'aide l'AMPS-1D en fonction de l'épaisseur et la densité des états de la couche active (DOS 1: $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, DOS 2: 10^{16} cm^{-3}, DOS 3: 10^{17} cm^{-3}).	77
Figure IV.4 : Les Caractéristiques (J_{SC} , E_{ff} , FF , V_{OC}) de la cellule (p-i-n) à simple (a-Si :H) en conditions d'illumination AM1.5G simulée à l'aide l'AMPS-1D en fonction de l'épaisseur et l'énergie de gap de la couche active.	79
Figure IV.5 : Taux de recombinaison en condition de circuit ouvert ($V = V_{OC}$) à	80

différents valeurs de gap de la couche active E_g de la cellule (p-i-n) à simple jonction à base de (a-Si :H).

- Figure IV.6 :** rendement quantique de la cellule solaire (p-i-n) à simple jonction à base de (a-Si :H) simulée en conditions de court- Circuit ($V=0$) et d'illumination AM1.5G à l'aide de AMPS-1D. 81
- Figure IV.7 :** Représentation schématique Des trois cellules solaire simple à base (CdTe). 84
- Figure IV.8 :** Le diagramme des bandes trois cellules à l'équilibre thermodynamique. 86
- Figure IV.9 :** Caractéristique courant tension sous AM1.5 illumination pour les trois cellules. 87
- Figure IV.10 :** Les Caractéristiques (J_{SC} , E_{ff} , FF , V_{OC}) des trois cellules en conditions d'illumination AM1.5G simulée à l'aide l'AMPS-1D en fonction de l'épaisseur de la couche (CdTE). 88
- Figure IV.11 :** rendement quantique de la cellule solaire à hétérojonction simulée en conditions de Court- Circuit ($V=0$) et d'illumination AM1.5G à l'aide de m'AMPS-1D. 90
- Figure IV.12 :** Les Caractéristiques (J_{SC} , E_{ff} , FF , V_{OC}) des trois cellules en conditions d'illumination AM1.5G simulée à l'aide l'AMPS-1D en fonction de l'épaisseur la couche (CdS) . 92
- Figure IV.13 :** rendement quantique de la cellule solaire à hétérojonction simulée en Court- Circuit ($V=0$) et d'illumination AM1.5G à l'aide de m'AMPS-1D. 93
- Figure IV.14 :** Les Caractéristiques (J_{SC} , E_{ff} , FF , V_{OC}) des trois cellules en conditions d'illumination AM1.5G simulée à l'aide l'AMPS-1D en fonction de l'épaisseur la couche(ZnO). 94
- Figure IV.15 :** rendement quantique de la cellule solaire à hétérojonction simulée en conditions de Court- Circuit ($V=0$) et d'illumination AM1.5G à l'aide de m'AMPS-1D. 95
- Figure IV.16 :** Les Caractéristiques (J_{SC} , E_{ff} , FF , V_{OC}) de la cellule (CdS/CdTe) en conditions d'illumination AM1.5G simulée à l'aide l'AMPS-1D en fonction de l'épaisseur la couche (CdTe) et la densité des états de la couche active (**DOS 1: $2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, DOS 2: $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$**). 96

Liste des tableaux :

Tableau II. 1 : Gap de différents matériaux photovoltaïques.	27
Tableau II.2 : Principales propriétés optoélectroniques du (CdTe).	33
Tableau II.3 : Les caractéristiques importantes de l'oxyde de zinc.	38
Tableau II.4 : Propriétés électriques de films (ZnO) purs dopés indium à température ambiante.	42
Tableau IV.1 : Les paramètres des différentes couches de cellule p-i-n à base de silicium amorphe.	75
Tableau IV.2 : Les paramètres des différentes couches.	85

Liste des abréviations

<i>AM</i>	Masse d'air
<i>AMG</i>	Masse d'air global
<i>AMPS-1D</i>	Analysis of Microelectronic and Photonic Structures-one Dimension
<i>ITO</i>	Oxyde d'indium dope à l'étain
<i>IZO</i>	Oxyde de zinc dopé indium
<i>OTC</i>	Oxyde transparent conducteur
<i>ZCE</i>	Zone de Charge d'Espace
<i>CBD</i>	Dépôt par bain chimique
<i>TPES</i>	Total Primary Energy Supply
<i>GJ</i>	gigajoules
<i>a-Si:H</i>	Silicium amorphe hydrogéné
<i>Al</i>	Aluminium
<i>Se</i>	Sélénium
<i>CsI</i>	Iodure de sélénium
<i>ZnO</i>	Oxyde de zinc
<i>CdTe</i>	Tellurure de cadmium
<i>CdS</i>	Sulfure de cadmium
<i>Wf</i>	Travail de sorti
<i>Rs</i>	Résistance série
<i>Rsh</i>	Résistances shunt
<i>Jsc</i>	Densité de courant de court-circuit
<i>Voc</i>	Tension de circuit ouvert
<i>Eff</i>	Rendement des cellules
<i>FF</i>	Facteur de forme

Liste des abréviations

<i>Bc</i>	Bande de conduction
<i>BI</i>	Bande interdite
<i>Bv</i>	Bande de valence
<i>Eg</i>	Largeur de la bande interdite
<i>Eopt</i>	Optical band-gap energy (eV)
μ	Mobilité des porteurs de charge
α	Coefficient d'absorption
<i>TFSC</i>	Thin-film Solar Cells. (Cellules solaires en couche mince)
<i>VIS et IR</i>	Visible et infrarouge.
<i>Nc</i>	Densité effective des états dans la bande de conduction.
<i>Nv</i>	Densité effective des états dans la bande de valence.
<i>NA</i>	Densité des accepteurs.
<i>ND</i>	Densité des donneurs.
$\mu_e(MUN)$	Mobilité des électrons.
$\mu_h(MUP)$	Mobilité des trous.
<i>QE</i>	Rendement quantique (Quantum efficiency).
<i>RS</i>	Réponse spectrale.
Φ_b	Hauteur de la barrière de potentiel ($\Phi_b = PHIBO/L$).
<i>n</i>	Indice de réfraction.
χ/CHI	Affinité électronique de semi-conducteur.
<i>DOS</i>	Densité des états.

Introduction générale

Introduction générale

Ces dernières années, les enjeux climatiques, la réduction des énergies fossiles, l'inévitable hausse des prix et la demande croissante d'énergie sont autant d'arguments qui soutiennent le développement des énergies renouvelables. Parmi les sources d'énergie alternatives, les énergies renouvelables semblent être une voie privilégiée, qui a connu une croissance exponentielle ces dernières années. Comme son nom l'indique, l'énergie renouvelable fait référence à l'énergie inépuisable disponible pour l'humanité : l'énergie géothermique, l'énergie éolienne, l'énergie de la biomasse, l'hydroélectricité et enfin l'énergie solaire en font donc partie.

Actuellement, le coût de l'électricité solaire photovoltaïque (SPV) est plus élevé que l'électricité conventionnelle de réseau. Afin de rendre le système SPV économiquement fiable pour les applications à grande échelle, le coût par watt (WC) du module doit être réduit. Ceci peut être réalisé en réduisant les coûts de matériaux ou en augmentant l'efficacité de conversion des cellules solaires, ou les deux.

Les semi-conducteurs forment un tournant incontournable dans le développement technologique. Afin d'atteindre ces performances dans le photovoltaïque, de nouveaux domaines de recherche se développent constamment. Au milieu des années 1950, il était clair que le silicium était devenu le matériau de choix pour les produits électroniques. Aujourd'hui, il est le semi-conducteur le plus important qui alimente la microélectronique et la technologie des dispositifs photovoltaïques.

La technologie des couches minces et son application dans les cellules solaires bénéficient de coûts de matières premières inférieurs et de dépôts sur divers substrats, réduisant ainsi considérablement les coûts de fabrication [1,2]. Les matériaux de deuxième génération des couches minces pour les applications photovoltaïques comprennent le CdTe, Cu (In,Ga)Se₂, a-Si:H et ces alliages. Au cours des deux dernières décennies, la technologie des cellules solaires et autres équipements électroniques à base de silicium amorphe-hydrogène (a-Si:H) est devenue assez mature depuis Carlson et al, qui ont produit la première cellule à base de (a-Si:H) [3], pour une efficacité de conversion de plus de 14%.

Dans le premier aspect, les cellules solaires à couches minces à base de silicium amorphe hydrogéné et ses alliages (a-Si:H, a-SiC:H, etc....) sont prometteuses, car le matériau d'origine (Silice) est largement disponible dans la nature.

Introduction générale

Un autre avantage majeur du (a-Si :H) est son coefficient d'absorption élevé, qui le rend capable d'absorber un rayonnement incident pour juste une épaisseur de 0.5 à 2 micromètres [4].

Les avantages du silicium (a-Si :H), et avec des procédés de dépôt et des techniques de fabrication beaucoup plus faciles rendent la cellule solaire en couche mince à base de silicium amorphe (a-Si :H) un candidat principal pour devenir par la suite un concurrent sérieux aux sources conventionnelles d'électricité [5].

Le tellure de cadmium (CdTe) sous forme de cellule solaire poly cristalline à couche mince est l'un des candidats les plus promoteurs pour la conversion d'énergie photovoltaïque. Le (CdTe) présente plusieurs avantages, à commencer par son écart de 1.5eV [6,7], qui est proche de la valeur idéale. Ce matériau a un coefficient d'absorption élevé, peut absorber 90% des photons incidents sur une couche de seulement quelques microns, et possède une stabilité chimique et thermique élevée. La couche de sulfure de cadmium (CdS) est principalement utilisée pour transporter des électrons, qui sont principalement photo générés dans la région de charge d'espace de tellure de cadmium(CdTe).

En laboratoire, notamment sur First Solar, le meilleur rendement obtenu atteint 22.1% pour une cellule solaire réalisée avec des matériaux, des équipements et un procédé adaptés à une production de volume [8]. De plus, la technologie a été bien développée au niveau industriel. Deux problèmes spécifiques gênent le développement des cellules solaires à base de (CdTe). Premièrement, le film (CdTe) de type : p, a une résistance relativement élevée, ce qui peut avoir un effet néfaste sur l'efficacité de conversion en raison de la perte de résistance générée. Le deuxième problème vient du fait que le cadmium est un métal lourd et nocif peut provoquer des problèmes environnementaux liés à son utilisation dans le processus de fabrication et de recyclage. Cependant, cet aspect n'a pas empêché le développement significatif des cellules au cadmium.

Le travail consigné dans cette thèse est l'étude de l'amélioration des propriétés de matériaux semi-conducteurs pour l'application aux cellules photovoltaïques. Notre objectif est d'étudier l'effet de plusieurs paramètres (Epaisseur, énergie de gap, densité d'états,.....) sur les performances de la cellule ainsi que l'extraction de paramètres physiques caractérisant chacune des couches constituant les cellules.

Dans le premier chapitre, nous présentons un ensemble d'informations générales sur le domaine de la conversion photovoltaïque ainsi que le principe de fonctionnement des cellules solaires,

leurs principales caractéristiques et les limites du modèle théorique. Et nous finirons par les différentes filières photovoltaïques.

Dans le deuxième chapitre, nous présentons les propriétés cristallographiques, physiques et optiques des matériaux de la filière silicium (Le silicium amorphe hydrogéné (a-Si :H), les semi-conducteurs binaires de groupe (II.VI) (CdTe, CdS) et l'oxyde de Zinc (ZnO)).

Le troisième chapitre présente spécifiquement le logiciel de calcul numérique AMPS-1D utilisé dans notre simulation. Le logiciel est adapté à la simulation des cellules solaires et conçu sur la base des équations fondamentales décrivant les variations du potentiel électrique et les densités de courant, pour les deux types de porteurs.

Enfin, le quatrième chapitre a été réservé à la simulation de deux cellules solaire : une, à base de silicium amorphe et l'autre à base de cadmium et avec une l'interprétation de l'efficacité et du rendement.

Références

- [1] W. Fuhs, R. Klenk, " Proc. 2nd World Conference on Photovoltaic Solar Energy Conversion", Vienna, Austria, pp. 381-386,(1998).
- [2] D. Bonnet, M. Harr, "Proc. 2nd World Conference on Photovoltaic Solar Energy Conversion", Vienna, Austria, pp. 397-402(1998),.
- [3] D.E. Carlson, C. R.Wronski, " Amorphous silicon solar cell", Appl. Phys. Letts. 28 , 671, (1976).
- [4] J. Loferski, "Theoretical Considerations Governing the Choice of the Optimum Semiconductor for Photovoltaic Solar Energy Conversion ", Appl. Phys., 27, 777, (1956).
- [5] N.Palit, "Amorphous silicon based solar cells: experimental characterization and computer modelling", Thesis, Energy Research Unit, Indian Association for the Cultivation of Science, Jadavpur, Calcutta 700032, India, (2000).
- [6] N. A. Jahan, M. Minhaz Ul Karim and M. M.Hossain "A High Efficiency Ultra-Thin (1.8 μm) CdS/CdTe p-i-n Solar Cell with CdTe and Si As BSF Layer "Advances in Science, Technology and Engineering Systems Journal Vol.3, No.1, 213-217 (2018).
- [7] Imad Eddine .Tinedert , Achour. Saadoune , Idris. Bouchama , Mohammad Alam .Saeed "Numerical modelling and optimization of CdS/CdTe solar cell with incorporation of Cu₂O HT-EBL layer", Optical Materials 106 , 109970, (2020).
- [8] A. Joffre "Rendement record de 22,10% en R&D pour une cellule en couche mince First Solar," (2016).

Chapitre I :
Généralités sur les cellules photovoltaïques

I.1. Introduction

Dans ce chapitre, nous aborderons d'abord quelques concepts liés aux principes de conversion photovoltaïque, l'énergie solaire et leurs applications. Ensuite, nous décrivons le fonctionnement des cellules photovoltaïques, leurs principales caractéristiques et les limites du modèle théorique, nous finirons par les différentes filières photovoltaïques.

I.2. Le principe de la conversion Photovoltaïque**I.2.1. Historique**

Le mot photovoltaïque (PV) vient du mot grec "photo", synonyme de lumière. Et "volt" vient du nom du physicien Italien Alessandro Volta. La tension est également attribuée à ceci: volts.

L'effet photovoltaïque a été découvert par : Becquerel, en 1839. Il a prouvé pour la première fois que certains matériaux peuvent directement convertir la lumière en énergie électrique [1].

Il a découvert que la lumière pénétrante dans les matériaux était à l'origine de l'expulsion des électrons de leur orbite grâce à l'interaction entre photons et atomes, produisant ainsi un courant électrique. En 1954, La première cellule photovoltaïque a été développée par des chercheurs du laboratoire Bell, aux États-Unis, et son efficacité n'était alors que de 4,5% [2]. En fait, c'est en 1958, que le premier satellite exploité par l'énergie photovoltaïque a été lancé, car l'industrie aérospatiale a investi beaucoup d'argent dans le développement de panneaux solaires.

En 1960, le développement en photovoltaïque était très avancé en utilisant des nouveaux matériaux semi-conducteurs comme l'arséniure de gallium (GaAs).

Les premières applications des cellules photovoltaïques ont été développées au milieu des années 70, environ 15 ans après l'industrie spatiale. Cependant, il faudra attendre la première crise pétrolière de 1973 pour qu'elle connaisse une véritable recrudescence et affronte la tendance à la hausse des coûts des combustibles fossiles [3].

D'autre part, les enjeux écologiques liés à l'utilisation des énergies fossiles ont conduit à des subventions gouvernementales pour encourager l'investissement dans l'énergie solaire. D'où elle va connaître une forte croissance [4].

Les recherches dans ce domaine continuent à se développer très rapidement avec de nouvelles technologies pour atteindre des rendements très élevés.

I.2.2. Développement du photovoltaïque dans le monde

En raison de ses avantages intéressants, au cours des deux dernières décennies, l'énergie photovoltaïque s'est considérablement développée dans le monde entier. Depuis 1998, le taux de croissance annuel moyen des parcs solaires photovoltaïques est de 35% [5].

En 2015, la production d'électricité photovoltaïque installée par l'industrie mondiale a augmenté de 50 GW (40 GW en 2014), et la capacité cumulée a atteint 229 GW, soit plus de 100 fois la capacité en 2000. La prévision pour 2016 et 2017 était respectivement de 61 GW et 67 GW [6].

La baisse de la demande mondiale en 2017 peut être due à la réduction des mesures de soutien prévues par certains pays. Cependant, les analystes et les employés du secteur sont optimistes voir la figure (I.1) [7].

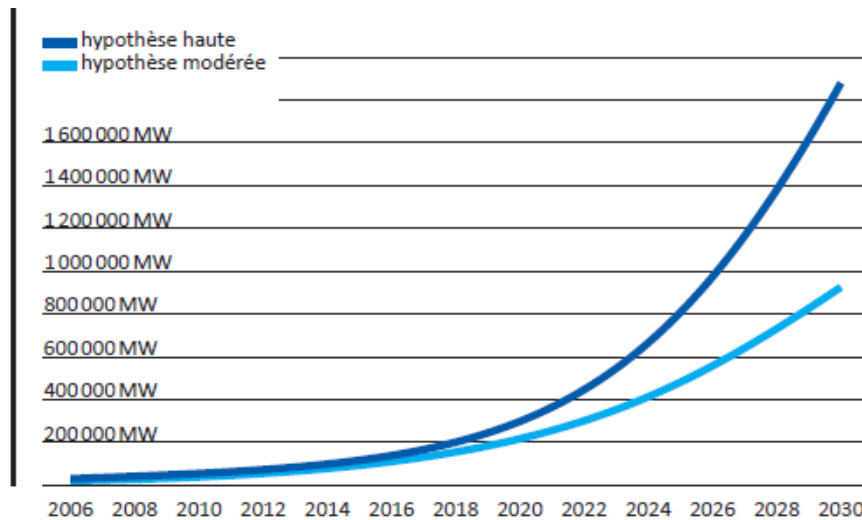


Figure I.1 : Capacité photovoltaïque globale cumulée à l'horizon 2030 [5].

En 2014, l'approvisionnement total mondial en énergie primaire (en anglais Total Primary Energy Supply, TPES) était de 13.700 MTEP (millions de tonnes équivalent pétrole, 1 tep = 41.868 GJ), dont 13,8%, ou 1,894 MTEP provenaient d'énergies renouvelables (une augmentation de 2,6% par rapport à 2013) Figure (I.2) [8].

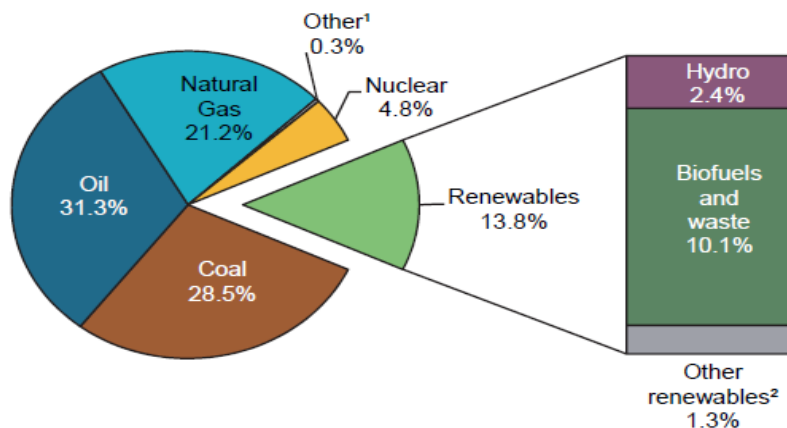


Figure I.2 : Approvisionnement énergétique primaire total dans le monde en 2014[8].

Le taux de 2.5 % pour l'énergie solaire est relativement faible par rapport à la totalité des énergies renouvelables. Cependant les recherches très avancées dans ce domaine tendent à améliorer ce taux Figure (I.3) [8].

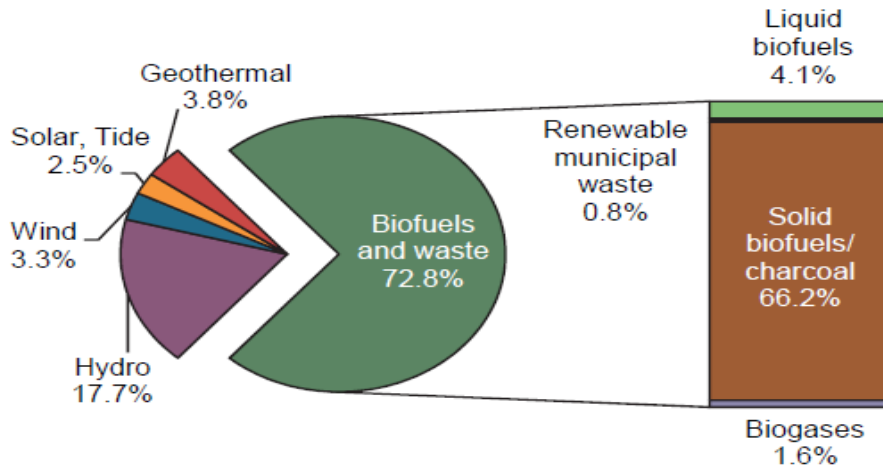


Figure I.3 : Part de la production des différentes énergies renouvelables [8].

Depuis 1990, le taux de croissance annuel moyen des énergies renouvelables est de 2,2%, légèrement supérieur au taux de croissance du TPES mondial de 1,9%. La croissance de l'énergie photovoltaïque et éolienne est particulièrement forte, avec un taux de croissance annuel moyen de 46,2% et 24,3% respectivement figure (I.4) [8].

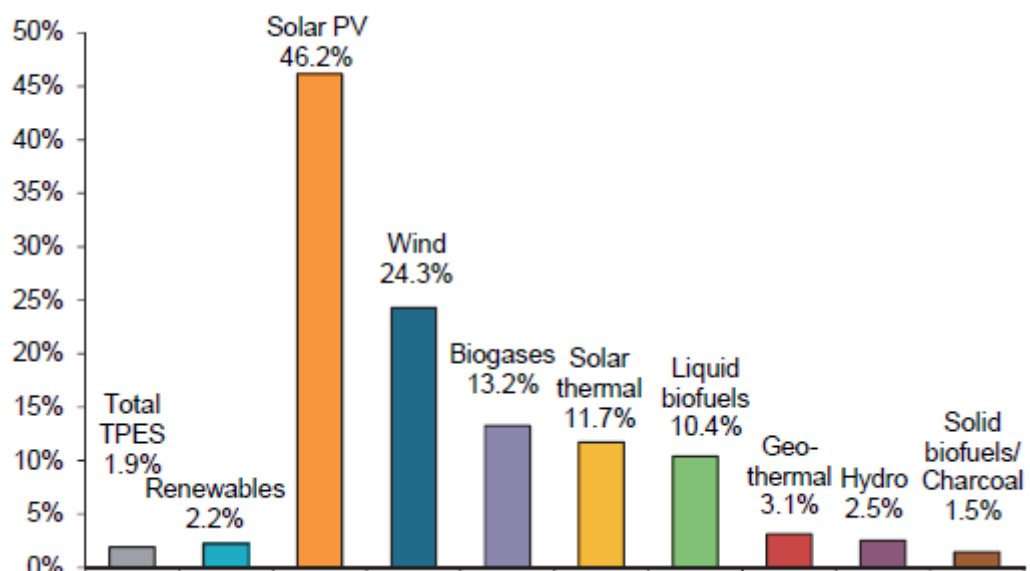


Figure I.4 : Taux de croissance annuel d'approvisionnement énergétique mondial de 1990 à 2014 [8].

I.2.3. Développement du photovoltaïque en Algérie

L'Algérie est fermement engagée dans le développement des énergies renouvelables afin d'apporter des solutions sérieuses et durables aux défis environnementaux et à la préservation des enjeux énergétiques d'origine fossile.

Un plan ambitieux est envisagé pour développer les énergies renouvelables au cours de la période (2015-2030), qui comprend une puissance installée totale de 22 000 MW, allouée selon le schéma de la figure (I.5) [9].

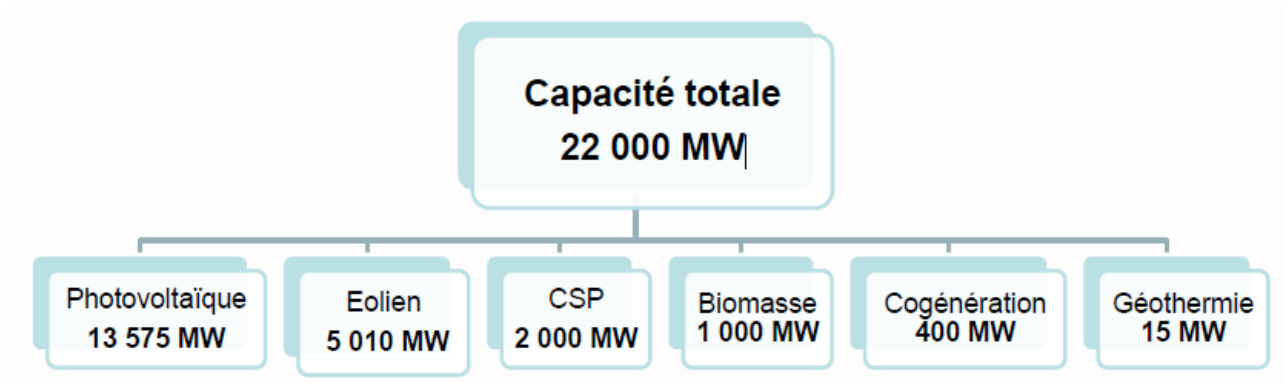


Figure I.5 : Répartition des capacités à installer par filière durant 2015-2030 en Algérie [9].

Le photovoltaïque représente 62 % du programme contre 23 % pour l'éolien et 9 % pour le thermique Figure (I-6) [9].

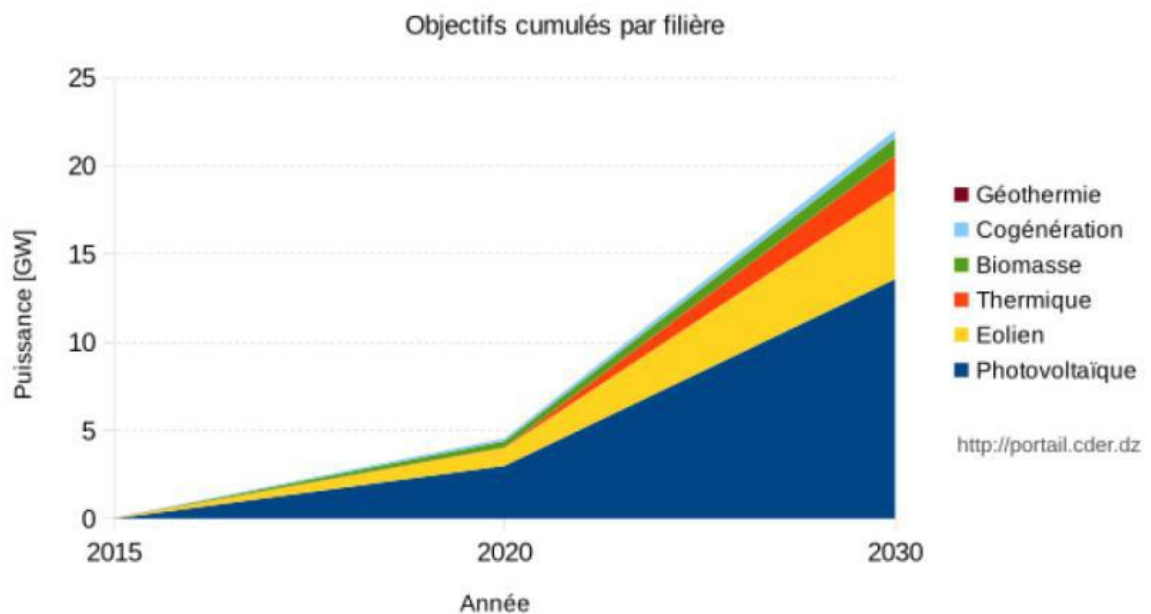


Figure I.6 : Phases du programme algérien des énergies renouvelables [10].

I. 3. Notion préliminaire sur le rayonnement solaire

Le développement, l'optimisation et la caractérisation de cellules photovoltaïques incluent une certaine connaissance de la source d'énergie utilisée : le soleil. À une température d'environ 5800 Kelvin, sa surface apparaît comme un corps noir, ce qui fait que le pic d'émission se situe à une longueur d'onde de $0,5\mu\text{m}$ [11]. Le rayonnement solaire moyen obtenu en dehors de l'atmosphère terrestre est d'environ 1.36 kW/m^2 . Lorsqu'il pénètre dans l'atmosphère, le rayonnement solaire sera pondéré par divers facteurs existant à la surface de la terre: l'atmosphère, les conditions climatiques, la longitude et l'altitude d'observation, et l'absorption saisonnière. Des gaz comme l'ozone (O_3) pour des longueurs d'onde inférieures à $0.3\ \mu\text{m}$, le dioxyde de carbone (CO_2) et la vapeur d'eau (H_2O) pour les infrarouges au-dessus de $2\ \mu\text{m}$, absorbent les énergies proches de leurs énergie de liaison, ce qui conduit à des «trous» dans le spectre solaire visible au sol, Figure (I-7). De plus, la présence de poussières et d'aérosols dans l'atmosphère entraîne une répartition de l'absorption sur presque tout le spectre, ce qui entraîne une diminution globale de la puissance incidente.

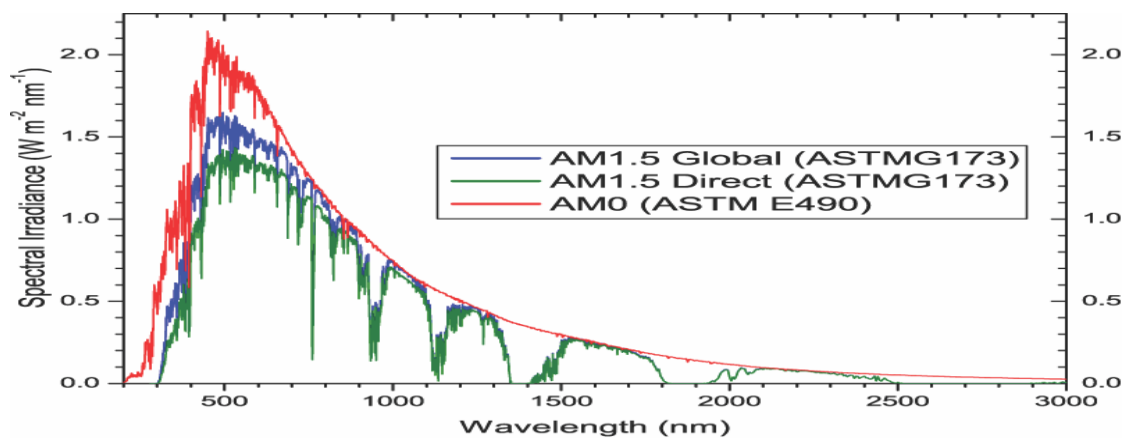


Figure I.7 : Représentation graphique des spectres AM0 et AM1.5 d'après [11].

Mettant en évidence la plage spectrale utile pour les cellules en silicium, et à mesure que l'intensité et le spectre de la lumière du soleil à la surface de la Terre changent, une référence appelée Qualité de l'Air (AM) a été établie pour comparer et unifier les performances des cellules photovoltaïques avancées dans le monde entier.

AM0 correspond l'irradiante hors atmosphère. AM1 correspond à l'irradiante du soleil lorsqu'il est au zénith, distance minimum à parcourir par les photons à travers l'atmosphère. La référence la plus utilisée est AM1.5G, elle correspond à une position à 45° du soleil par rapport au zénith

et permet d'obtenir un rayonnement d'environ 1 KW/m^2 . Le «G» représente le rayonnement «global» incluant rayonnement direct et rayonnement diffus. [12].

Il semble que la partie la plus importante du spectre solaire à la surface de la terre concerne le domaine du visible et du proche infrarouge. Les irradiances définies par le nombre AM ne tiennent toutes fois pas compte de la variété des conditions climatiques, et de l'altitude du lieu. En Algérie, la moyenne annuelle du rayonnement solaire global reçu sur un plan en pente en latitude est illustrée à la figure(I.8):

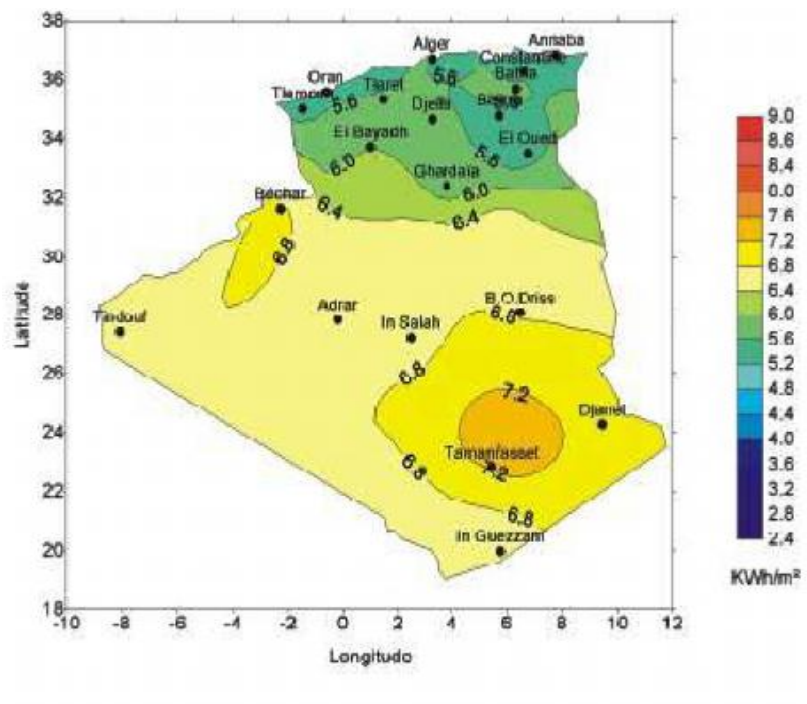


Figure.I.8 : Moyenne annuelle de l'irradiation Solaire globale reçue sur un Plan incliné à l'attitude du lieu, en Algérie [13].

I.4. L'interaction rayonnement/semi-conducteur

Les trois processus qui peuvent se produire lors de l'interaction rayonnement/semi-conducteur Sont :

- l'absorption fondamentale qui représente le passage d'un électron d'un état occupé de la bande de valence à un état vide de la bande de conduction après l'absorption d'un Photon,
- l'émission spontanée qui représente le passage d'un électron de la bande de conduction à la bande de valence avec émission d'un photon,
- L'émission stimulée fait référence au passage d'électrons de la bande de conduction à la bande de valence après avoir absorbé un photon et émis un second photon.

Ces différents processus sont fonction du type de semi-conducteur. Nous devons distinguer les semi-conducteurs à bande interdite directe et ceux à bande indirecte.

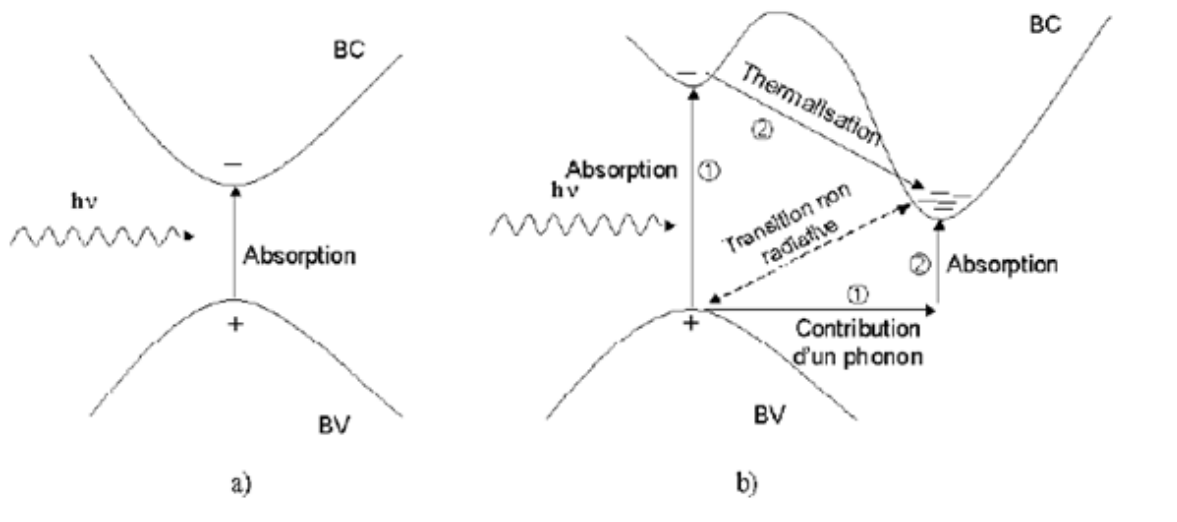


Figure I.9 : Transitions bande à bande dans un semi-conducteur (a) à bande interdite directe et (b) à bande interdite indirecte [14].

Un semi-conducteur est à bande interdite directe quand le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont obtenus pour une même valeur du vecteur d'onde k (voir figure I.9(a)).

Les transitions bande à bande (de la bande de conduction vers la bande de valence) sont radiatives (émission spontanée) et sont favorisées avec ce type de semi-conducteur utilisé en optoélectronique (matériau III-V en général comme le GaAs).

Un semi-conducteur est à bande interdite indirecte quand le minimum de la bande de conduction est décalé par rapport au maximum de la bande de valence dans l'espace des k . Les transitions bande à bande impliquent un changement de vecteur d'onde k et sont donc non-radiatives (voir figure I.9(b)). Même pour des photons d'énergie plus élevée, les électrons peuvent être directement excités vers le minimum relatif de la bande de conduction et thermalisés dans le minimum absolu de la bande de conduction. La transition électronique dans le matériau à bande interdite est assistée par les phonons absorbés ou émis par l'électron, de sorte que son vecteur d'onde correspond à la valeur maximale de la bande de valence pour absorber le photon.

I.5. Fonctionnement et caractéristiques de sortie d'une cellule photo- voltaïque

Le fonctionnement de toute cellule photovoltaïque repose sur l'existence d'un champ interne afin de séparer les paires électron-trou générées par absorption lumineuse. Cette barrière potentielle peut être créée par les conceptions suivantes:

- Une jonction p-n avec le même semi-conducteur est appelée une homo-jonction.
- Une jonction p-n avec deux semi-conducteurs différents que l'on appelle **hétérojonction**.
- Un contact métal/semi-conducteur de type Schottky.

Ces jonctions sont étudiées par simulation dans le quatrième chapitre.

Le principe de fonctionnement d'une cellule à jonction (p-n) à homo-jonction est décrit dans la Figure (I.10). Les photons incidents créent des paires électron-trou et selon deux possibilités :

1- Si une paire est générée dans une zone électriquement neutre (p ou n), les porteurs se diffusent, si les porteurs minoritaires atteignent la zone de charge d'espace, ils seront poussés par le champ électrique dans la région qui devient majoritaire. Ces porteurs contribuent ainsi au courant par leur diffusion en créant un courant de diffusion.

2- Si une paire est générée dans la zone de charge d'espace, l'électron et le trou sont séparés par le champ électrique et chacun est propulsé dans la région où il est porteur majoritaire (région n pour l'électron et région p pour le trou). Ces porteurs donnent naissance à un courant de génération.

Ces deux contributions provoquent un photo-courant, qui contribue au courant inverse de la diode formée par la jonction. Le courant inverse de la jonction (p-n) est fonction de la densité de porteurs minoritaires dans la région neutre de la diode et de la génération de paires électron-trou dans la région de charge d'espace.

L'éclairement augmente le courant inverse par la création de porteurs minoritaires dans les zones neutres et la génération de paires électron-trou dans la zone de charge d'espace.

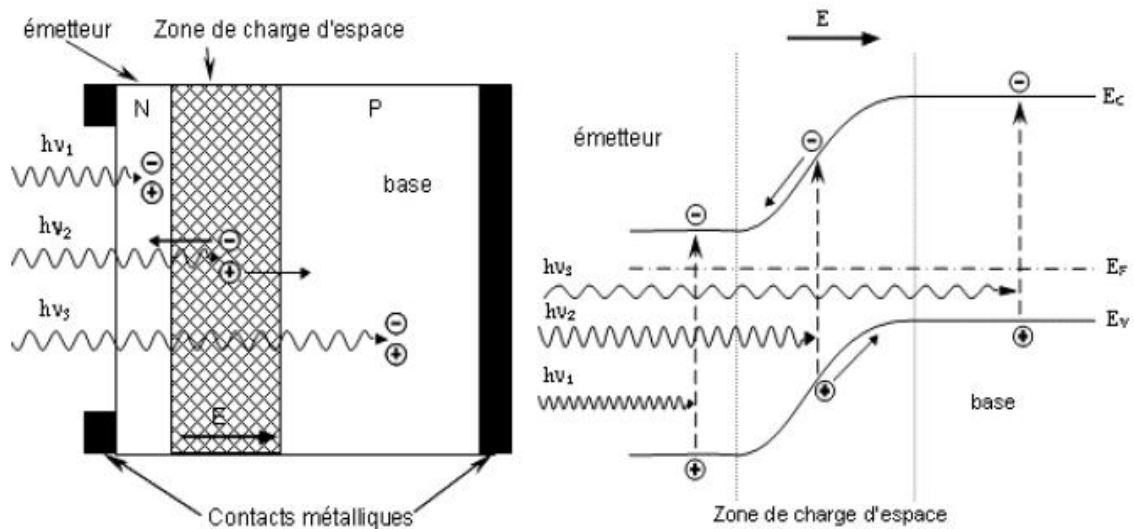


Figure I.10 : Illustration du fonctionnement d'une cellule photovoltaïque conventionnelle [20].

Sous illumination, le courant aux bornes d'une jonction (p-n) qui constitue la cellule photovoltaïque est donné par l'expression suivante :

$$I = I_s \left[\exp \left[\frac{qV}{iK_B T} \right] - 1 \right] - I_{ph} \quad (\text{I.1})$$

Où I_s est le courant de saturation, V est la tension appliquée, i est le facteur d'idéalité de la diode, I_{ph} le courant photo-généré, q la valeur absolue de la charge élémentaire, K_B la constante de Boltzmann et T la température.

Les paramètres de sortie d'une cellule photovoltaïque sont ainsi définis à partir de la Caractéristique $I(V)$ sous illumination :

I_{CC} : Le courant de court-circuit qui correspond au courant obtenu à $V=0$.

V_{OC} : La tension de circuit ouvert qui correspond à un courant nul.

V_{max} : La tension obtenue au point de fonctionnement maximal (puissance maximale)

I_{max} : le courant obtenu au point de fonctionnement maximal (puissance maximale)

FF : Le facteur de forme défini par :

$$FF = \frac{V_{max} I_{max}}{V_{OC} I_{CC}} \quad (\text{I.2})$$

η Le rendement de conversion est le rapport entre la puissance maximale P_{\max} obtenue avec la cellule sur la puissance incidente (P_{inc} est donnée par unité de surface):

$$\eta = \frac{P_{\max}}{P_{inc} S} = \frac{V_{\max} I_{\max}}{P_{inc} S} = FF \frac{V_{OC} I_{CC}}{P_{inc} S} \quad (I.3)$$

La formule (1.2), correspond à la relation courant-tension d'une cellule idéale. En pratique, des résistances série R_S et parallèle R_P existent et la relation courant-tension d'une cellule réelle est donnée par :

$$I = I_S \left[\exp \left[\frac{(V - R_S I)}{i K_B T} \right] - 1 \right] - \frac{(V - R_S I)}{R_P} - I_{ph} \quad (I.4)$$

I.6. Facteurs limitant le rendement

En pratique, la conversion d'énergie lumineuse en énergie électrique n'est pas totale. Différentes pertes viennent influencer le rendement d'une cellule.

Ces pertes peuvent être classées en deux catégories : Les pertes dues à la nature du matériau et les pertes dues à la technologie utilisée [15].

I.6.1. Pertes engendrées par l'utilisation du silicium

- **Pertes par les photons de longueur d'onde supérieure au gap** : tous les photons avec une longueur d'onde supérieure à celle associée au gap du semi-conducteur ($\lambda > \lambda_g$) ne peuvent pas fournir suffisamment d'énergie pour déplacer un électron de la bande de valence à la bande de conduction. Son énergie sera alors perdue. Néanmoins, le mécanisme d'absorption photonique peut encore repousser la limite inférieure de l'énergie correspondante à l'entrefer du matériau (1,052 V au lieu de 1,124 dans le cas de l'absorption photon assistée dans le silicium [16]). Sous éclaircissement AM1.5, ces pertes sont estimées à 23,5% dans le silicium [17].
- **Pertes dues à l'énergie excédentaire des photons** : Les photons avec une énergie supérieure au gap génèrent une seule paire électron-trou. L'énergie excédentaire

supérieure à la largeur de bande interdite est dissipée sous forme de chaleur (chauffage). Dans le cas du silicium, sous lumière, ces pertes sont estimées à 33% de la puissance totale [17].

- **Facteur de forme FF** : L'équation courant-tension est contrôlée par l'équation de Boltzmann sous forme exponentielle $\left[\exp\left[\frac{qV}{KT}\right] \right]$. Par conséquent, la courbe $I(V)$ ne peut pas avoir une forme rectangulaire, et même dans le cas d'une cellule idéale, le facteur de forme ne peut pas dépasser 0,89 [15]. Le terme dépend également de la qualité de la jonction p-n, de la résistance série et de la résistance parallèle [18].
- **Chute de tension en circuit ouvert** : cette tension devrait correspondre à la tension du gap E_g/q mais les meilleures V_{OC} obtenues sont de l'ordre de 700 mV. Cette différence est principalement due aux chutes de potentielles au niveau des contacts, à la jonction (p-n) (Band gap narrowing)...

I.6.2. Les pertes technologiques

- **Les réflexions** : L'indice de réfraction du silicium est différent de celui de l'air, évidemment, et bien que la réflexion se produit à leur interface, ce ci limitera l'efficacité de la cellule. Le coefficient de réflexion R peut être optimisé en réalisant la couche antireflet et le traitement de surface de réflexions multiples [19].
- **Le taux d'ombrage** : Sur la cellule standard, les contacts métalliques présents sur la face avant, permettent la collecte des porteurs, formant une partie opaque, limitant l'entrée de photons dans la cellule. Ensuite, la taille de la métallisation est un compromis entre la perte optique due à la couverture partielle de l'émetteur et la perte de facteur de forme provoquée par la résistance série liée à la taille de la métallisation [19].
- **Le rendement d'absorption** : En raison de la limitation de l'épaisseur de la cellule, certains photons avec l'énergie requise ont traversé l'épaisseur de la cellule bien qu'ils ne soient pas absorbés. Lorsque la cellule est très mince ($<100 \mu\text{m}$), ce terme devient important et peut être minimisé en utilisant une couche réfléchissante à l'arrière de la cellule (réflecteur) [19].
- **Rendement de collecte** : c'est le rapport entre le nombre de porteurs effectivement collectés et le nombre total de porteurs photo générés. En effet, certains porteurs se recombinent dans le volume ou à la surface, avant leur collecte.

Ce phénomène dépend de la durée de vie τ des porteurs minoritaires (temps moyen entre la génération et la recombinaison d'un porteur minoritaire). Ces recombinaisons peuvent être réduites en mettant en œuvre différents traitements [19].

I.7. Schéma électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque

La (figure I.11) propose un modèle électrique de la cellule photovoltaïque prenant en compte les différents facteurs limitatifs. On y retrouve le générateur de courant I_{ph} correspondant au courant photo-généré ainsi que des résistances complémentaires (R_s et R_p) deux diodes (d_1 , d_2) et R_c la résistance de charge [20].

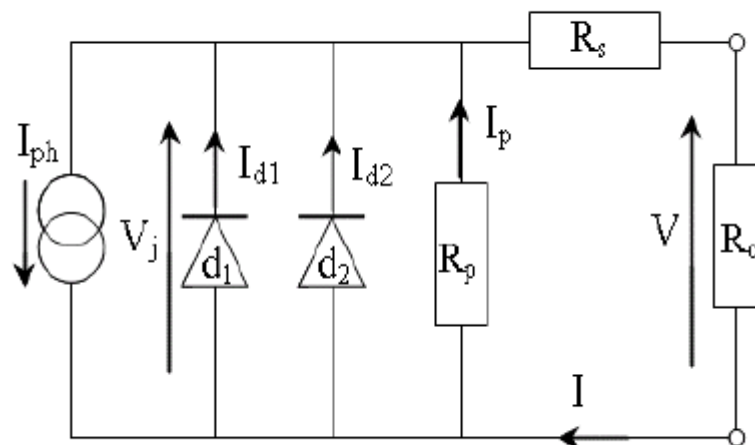


Figure I.11 : Schéma électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque [20].

- **Générateur de courant** : il délivre le courant I_{ph} correspondant au courant photo-généré.
- **Résistance série R_s** : Il prend en compte la résistivité spécifique du contact entre les différentes régions de la cellule (c'est à dire l'émetteur, la base et les contacts métalliques). Idéalement, ce terme doit être le plus bas possible pour limiter son impact sur le courant de la cellule. Ceci peut être réalisé en optimisant le contact métal / semi-

conducteur et en réduisant la résistivité des matériaux utilisés. Cependant, un dopage trop élevé entraîne une augmentation de la recombinaison des porteurs.

- **Résistance parallèle R_p** : également connue sous le nom de résistance de court-circuit, elle traduit l'existence de shunts à travers l'émetteur, causé par un défaut. Ceci est le cas lorsque la diffusion des contacts métalliques à haute température perce l'émetteur. Elle peut aussi être due à un court-circuit sur les bords de la cellule. Cette valeur devra être la plus élevée possible.
- **Diode d_1** : modélise la diffusion des porteurs dans la base et l'émetteur. Son influence sera d'autant plus grande que le matériau présentera une bonne longueur de diffusion.
- **Diode d_2** : modélise la génération/recombinaison des porteurs dans la zone de charge d'espace.

$$I(V) = I_{ph} - I_{d1} - I_{d2} - \frac{V_j}{R_p} = \quad (I.5)$$

$$I_{ph} - I_{s1} \left[\exp(\alpha_1 V_j) - 1 \right] - I_{s2} \left[\exp(\alpha_2 V_j) - 1 \right] - \frac{V_j}{R_p}$$

Avec :

$V_j = V + I.R_s$ (Dans le cas où la courbe (I-V) est représentée dans le quadrant correspondant au courant et à la tension positifs) ;

I_{ph} : Courant de photo-génération ;

I_{d1} : Courant de génération recombinaison ou d'effet tunnel dans la zone de charge d'espace ;

I_{d2} : Courant de diffusion dans les zones neutres ;

R_p : Résistance parallèle;

R_s : Résistance série ;

I_s : courant de saturation ;

$\alpha = q/nKT$; Avec n : facteur d'idéalité de la diode.

I.8. Les différentes filières photovoltaïques

Les cellules photovoltaïques sont regroupées en plusieurs filières. Leur différence réside dans les matériaux de conception utilisés, le processus de fabrication et le nombre de jonctions utilisés dans la cellule. La figure I.12 montre l'augmentation progressive du rendement, au fil du temps.

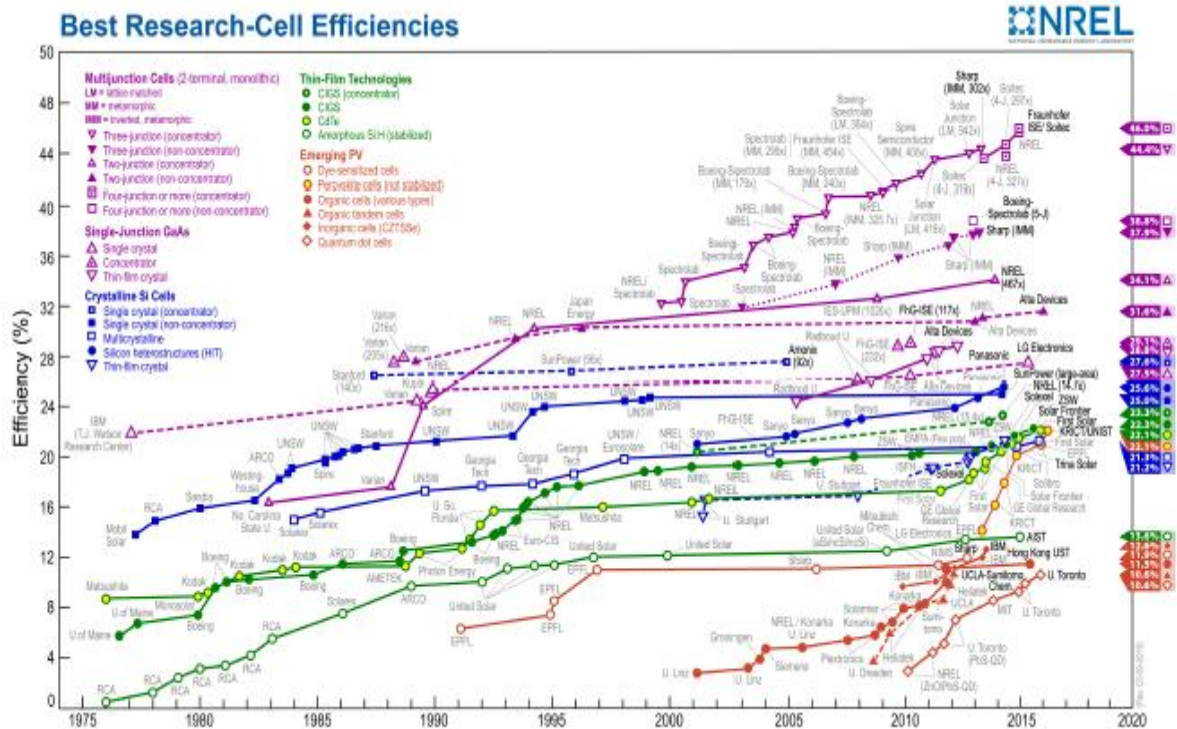


Figure I.12 : Évolution des records de rendements de chaque filière de cellules photovoltaïques [21].

Actuellement, il existe quatre filières : la filière à base de silicium cristallin, y compris monocristallin et poly cristallin, représente 88% de la production mondiale. Industrie des couches minces, y compris les cellules de silicium amorphe ; tellurure de cadmium, CIGS (alliage de cuivre, d'indium, de gallium et de sélénium) et l'arséniure de gallium. Et aussi la filière des cellules organiques et la filière des cellules pérovskites [22,23].

I.8.1. La filière silicium cristallin**I.8.1.1. Le silicium monocristallin :**

La technologie monocristalline est coûteuse car elle nécessite des barres de silicium pur. Il a le rendement le plus élevé (14% à 16%) et a l'avantage de réduire la taille du module sous la même puissance, ce qui est utile dans les situations où un gain de place est nécessaire.

I.8.1.2. Le silicium multi cristallin :

La technologie poly cristalline est obtenue en refondant les cristaux de silicium de rebut dans l'industrie électronique, et sa consommation d'énergie est deux à trois fois inférieure à la technologie précédente. Son rendement est moindre (12 à 14%), mais son coût est plus avantageux, ce qui fait que la technologie domine actuellement le marché.

Au niveau des cellules à une seule jonction, les filières silicium ont de meilleurs rendements de conversion. Les cellules à base de silicium sont actuellement les principaux produits sur le marché [24,25]. Cependant, leur développement est encore limité par des coûts élevés.

Plusieurs solutions coexistent pour réduire le coût des cellules PV:

-Réduire la qualité des matériaux utilisés en utilisant des substrats minces [26,27] ou en utilisant une nouvelle technologie de transfert de couche [27], ou réduire le coût des plaquettes de silicium (substrats) en réduisant la pureté des matériaux, et donc le prix, tout en maintenant une efficacité de conversion élevée [28].

-Améliorer l'efficacité de la transformation cellulaire est également une approche connexe. Pour cela, afin de rendre le rendement de conversion proche de 29%, beaucoup de travail a été effectué, ce qui est aussi la limite théorique de la technologie C-Si pour l'épaisseur optimale du substrat de 80 μm . Cependant, jusqu'à présent, le rendement maximal obtenu sur le matériel de laboratoire est de 25% [29].

I.8.2. La filière couches minces

Les cellules photovoltaïques à couches minces sont appelées cellules de deuxième génération car elles ont historiquement succédé à des cellules de silicium cristallin plus épaisses. L'intérêt de la technologie couche mince vient de la faible quantité de matériaux nécessaire à la fabrication d'une cellule comparativement aux cellules classiques. Contrairement aux cellules silicium cristallin de première génération, on ne dépose que la quantité de matériau photosensible efficace pour absorber l'essentiel du rayonnement solaire (quelques microns d'épaisseurs suffisent). Par ailleurs, on utilise des méthodes de fabrication moins coûteuses des cellules qui

permettent une intégration totale.

Les trois technologies émergentes sont aujourd'hui :

- le Silicium amorphe et microcristallin noté TFS_i (*Thin-Film Silicon en anglais*).
- Le Semi-conducteur Poly-cristallin CdTe (Tellurure de Cadmium).
- L'alliage $Cu(In,Ga)Se_2$ (cuivre-Indium/Gallium-Sélénium) noté dans la littérature CIGS.

I.8.2.1. Le silicium amorphe (a-Si:H)

Chittik et al. [30] ont déposé pour la première fois du silicium amorphe (a-Si) en déchargeant du silane en 1969. Les travaux de Carlson et al. ont révélé ses propriétés photoélectriques [31]. Une efficacité de conversion initiale de 2% a été enregistrée en 1976. Bientôt, il a prouvé l'effet bénéfique de l'hydrogène dans l'amélioration des caractéristiques photovoltaïques du silicium amorphe [32]. Dans le même contexte, la combinaison réussie du carbone et du germanium [33,34] a permis le développement de structures en tandem avec un taux de conversion de 15,2% [35].

Les cellules en couche mince en (a-Si:H) peuvent être réalisées dans deux configurations différentes : l'une dite "Superstrate" et l'autre dite "substrate" [36]. Dans le premier cas, le support du dépôt est la face avant de la cellule et les couches sont déposées dans l'ordre (p-i-n). le support (souvent du verre) doit donc être transparent. Dans le second cas, le support constitue la face arrière de la cellule, il peut donc être opaque et les couches sont déposées dans l'ordre (n-i-p). Voir figure I.13.

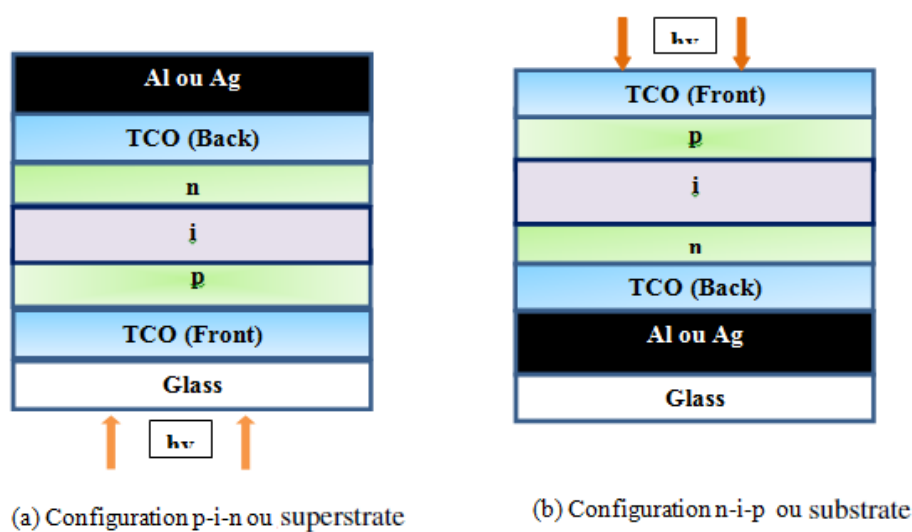


Figure I.13 : Schémas des configurations (a) (p-i-n) et (b) (n-i-p) d'une cellule solaire [36].

La conductivité de (a-Si:H) (même s'il est dopé) est également limitée, et le contact se fait sur la zone « n » et « p » par l'intermédiaire d'un oxyde transparent conducteur (TCO). Sur ce dernier support-avant. A la fin du procédé, un nouveau dépôt est déposé après la couche de type « n ».

Au dos du TCO, son indice optique étant proche de 2, il joue également le rôle de réflecteur.

Puisque l'épaisseur de la couche d'absorption de la cellule (p-i-n) est inférieure à 1 μm , le confinement optique des photons est critique. Les interfaces TCO / - avant et arrière jouent un rôle très important dans l'obtention de réflexions multiples, essentiellement, ce dernier point augmente la densité de courant, augmentant ainsi l'efficacité de la cellule.

Le processus de fabrication de ces cellules permet d'abaisser significativement les coûts de productions. En effet le cycle de production ne nécessite une très peu d'énergie et le processus peut générer de grandes surfaces unitaires, de l'ordre du mètre carré, en un seul tenant. Pour fabriquer un module, il suffit d'ajouter au processus une déposition de matériau conducteur entre les cellules servant d'interconnexion entre elles.

Afin d'améliorer les performances des cellules (a-Si:H), des structures à double jonction et triple jonction ont été développées [37]. Elles sont inspirées des cellules multifonction développées initialement pour le spatial, pour bénéficier au maximum du spectre solaire. Elles présentent néanmoins une mise en œuvre plus simple et mieux maîtrisée aujourd'hui pour le marché terrestre. Nous pouvons citer par exemple les cellules tandem à base de silicium à la fois amorphe et poly cristallin (a-Si/ $\mu\text{c-Si}$) [38,39]. Le meilleur rendement de laboratoire stabilisé de ces cellules est d'environ 12%. Comme la multi-jonction, il s'agit d'un problème d'empilement de deux cellules photovoltaïques qui absorbent des photons de différentes longueurs d'onde.

Grâce à ce mécanisme, un assemblage en série composé de deux cellules peut absorber un spectre plus large et donc générer plus d'énergie qu'une seule cellule à jonction.

La première couche de silicium amorphe absorbe une partie du spectre, et l'autre partie qui la traverse est absorbée par la seconde couche de silicium microcristallin. Le procédé de fabrication est le même que pour les couches minces, les différentes couches qui composent la cellule sont déposées par plasma (PECVD) sur un substrat de verre [38].

I.8.2.2. Le tellure de cadmium (CdTe)

Ils sont également appelés hétérojonctions à base de tellure de cadmium et de sulfure de cadmium. Les premières cellules ont été développées en 1972. Il y a quelques années, cette technologie semblait la plus adaptée aux films minces. Mais le problème est que le tellure est

un élément rare. Il peut s'épuiser ou ne plus avoir de quantités suffisantes pour assurer la pérennité des secteurs qui l'utilisent. Les cellules au tellure de cadmium présentent les avantages de la technologie à couche mince: elles sont légères et durables. Ces dernières années, ils ont en effet décollé, grâce à la commercialisation de la société américaine First Solar.

En août 2014, First Solar a annoncé que son efficacité de conversion de cellule avait atteint un record de 22,1% (CdTe).

I.8.2.3. Le diséléniure de cuivre et indium (CIS ou CIGS)

Les cellules à couches minces à base d'indium CuInSe_2 (CIS) et $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$ (CIGS) sont les cellules à couches minces les plus efficaces. Cette filière utilise des matériaux dont le gap énergétique peut être ajusté à partir du rapport atomique In / Ga, optimisant ainsi l'absorption du spectre solaire, de sorte que le gap peut varier de 1,02 eV (CuInSe_2 pur) à 1,68 eV (CuGaSe_2 pur).

Le coefficient d'absorption du diséléniure de cuivre d'indium (CIS) est de 100 à 1000 fois celui du silicium cristallin [40]. Ce composé de type I-III-VI a une structure chalcopyrite. Pour l'hétérojonction (n) CdS/(n) CuInSe_2 , le rendement théorique est d'environ 25%. Le rendement enregistré de la cellule basé sur le composé de chalcopyrite quaternaire $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$ est de 20,3% [41], et le rendement enregistré en laboratoire est de 18,8% [42], il est donc supérieur au CdTe, mais nécessitent des méthodes de fabrication plus difficiles et donc plus coûteuses.

I.8.3. La filière des cellules organiques

Après avoir observé que la conductivité de la phtalocyanine intrinsèque change avec la température, l'origine du concept de semi-conducteurs organiques remonte à 1984 [43]. L'élément de base de ces configurations est le carbone, avec des liaisons simples et doubles alternées [44]. Les matériaux semi-conducteurs organiques sont divisés en deux catégories: les petites molécules et les polymères conjugués. Les propriétés optiques et électriques de ces matériaux sont similaires et la technique de dépôt fera la distinction entre les petites molécules [45] et les polymères conjugués [46].

Contrairement aux matériaux inorganiques dopés, les matériaux organiques n'ont pas de porteurs minoritaires. Les propriétés des semi-conducteurs dépendent de leur affinité électronique.

À l'heure actuelle, la courte durée de vie et le faible rendement des cellules entravent leur développement à grande échelle, ce qui rend difficile la concurrence avec d'autres technologies [47].

I.8.4. La filière des pérovskites

La pérovskite est un composé minéral composé de calcium et de titane. Sa formule chimique est CaTiO_3 , découverte par le minéralogiste russe Lev Aleksevich Petrovsky (1792-1856). La structure la plus simple de la pérovskite et la structure cubique simple de formule ABX_3 (Figure I.14), [48]. La pérovskite a des propriétés physiques impressionnantes, un taux d'absorption de la lumière élevé et une grande longueur de diffusion de charge. En effet, la pérovskite hybride $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ (MAPbI_3) a un coefficient d'absorption important de $1,5 \times 10^4 \text{ Cm}^{-1}$ à 550 nm, qui se caractérise par une grande longueur de diffusion des électrons et des trous (plus de 1 μm , éventuellement plus de 100 μm), et enfin, sa mobilité est très élevée [49]. Une fois dopée au chlore, la structure hybride devient $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3\text{-xCl}_x$, qui correspond à MAPbI_3 et une presque même mobilité. Cependant, en raison des joints de grains plus petits, son dopage au chlore lui confère une cristallinité élevée. De plus, la taille des grains cristallins est un facteur qui limite la conduction des porteurs de charge [50]. En revanche, le dopage du chlore rend la mobilité de charge de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3\text{-xCl}_x$ légèrement inférieure à celle de son voisin MAPbI_3 [51].

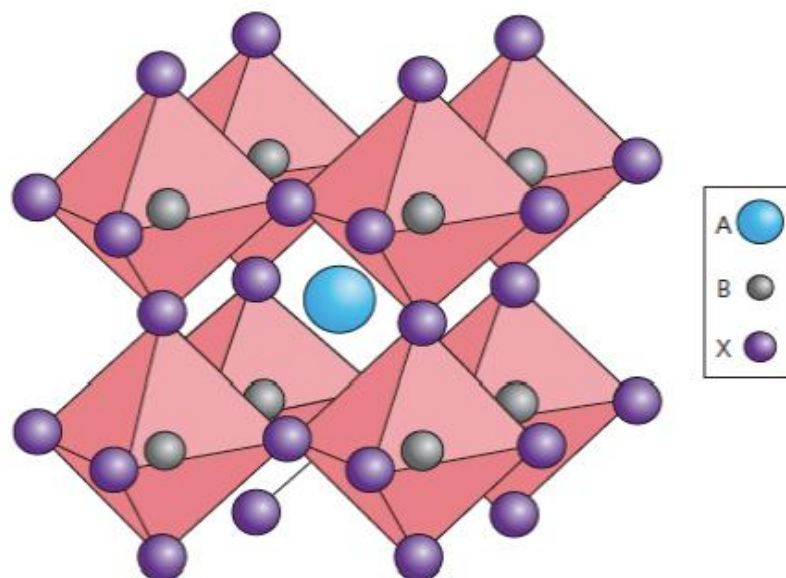


Figure I.14 : Structure hybride de la pérovskite [52].

I.8.5. Cellules multi-jonctions à haut rendement

Les cellules multi-jonctions se sont rapidement imposées comme la meilleure solution pour atteindre le plus haut rendement. La recherche américaine sur ce type de cellule a largement bénéficié du soutien de la NASA et de l'US Air Force à travers des programmes spatiaux et militaires. Ce travail se concentre d'abord sur l'unité à double jonction (GaAs/GaInP).

Les cellules commerciales ont une efficacité de 22% à une tension de 2,06 V. Il s'agit d'une cellule à trois jonctions (1,85 eV / 1,45 eV / 0,67 eV), qui détient le record du monde avec une efficacité de 37,3% (NREL) [53]. En combinant les espaces de chaque matériau de la jonction empilée, cette architecture permet d'optimiser la couverture du spectre solaire. Ces cellules sont produites industriellement par les sociétés américaines Spetrolab et Emcore, avec des rendements allant de 26% à 28%.

I.9. Références

- [1] E. Becquerel, "Mémoire sur les effets électriques produits sous l'influence des Rayons solaires", C.R. Acad. SCI. **9**, 561 (1839).
- [2] D. M. Chapin, C. S. Fuller, G. L. Pearson, "A New Silicon p-n Junction Photocell For Converting Solar Radiation into Electric Power", J. Appl. Phys. **25**, 676 (1954).
- [3] P. Wolfe, "Solar Photovoltaic Projects in the Mainstream Power Market", Routledge, (2013).
- [4] H. Procaccia, "L'énergie nucléaire, les énergies fossiles et renouvelables", (2014).
- [5] EPIA, "Le développement du photovoltaïque dans le monde", (2012).
- [6] S. Power Europe, "Wind Energy and Solar | Installed GW Capacity - Global and by Country", Available at : <http://www.fipowerweb.com/Renewable-Energy.html> ,(2016).
- [7] P. Clouds, "Photovoltaïque", (2015).
- [8] IEA, "Key renewables trends: development of renewables and waste, in the world", International Energy Agency, Except From Renewables Information, (2016).
- [9] Ministère de l'Énergie, "Les énergies renouvelables en Algérie", CRGE, Berlin, Février (2016).
- [10] Portail Algérien des Énergies Renouvelables, "Nouveau programme national de Développement des énergies renouvelables", (2015 -2030).
- [11] C. Honsberg, S. Bowden, "Photovoltaic; Devices, Systems and applications

- [CDROM] ", Sydney (Aus.): Univ, Of New South Wales, (1998).
- [12] B. Fléche, D. delagnes, "énergie solaire photovoltaïque", STI ELT juin (2007).
- [13] A. Meffi, M.YBouroubi, H. Mimouni, "Evaluation du potentiel énergétique solaire", Bulletin des énergies renouvelables, N2,P12, décembre (2002).
- [14] E .Fourmond, " Développement de techniques de dépôt plasma et photo assistées pour la réalisation des couches antireflets passivantes en SiNx :H sur silicium multi cristallin pour Applications Photovoltaïques", Thèse, INSA de Lyon,165p, (2002).
- [15] J. Szlufcik, S. Sivoththaman, J. Nlis, R.P. Mertens, R. Van Overstraeten " Low-Cost Industrial Technologies of Crystalline Silicon Solar Cells" Proceedings of the IEEE, vol.85, no.5, pp711-730,(1997),
- [16] M.A. Green "Silicon Solar Cells: Advanced Principles and Practice", (Sydney, Australia): Centre for photovoltaic devices and systems, UNSW, 366 p, (1995).
- [17] A. RICAUD, "Photopiles solaires de la physique de la conversion photovoltaïque aux Filières, matériaux et procédés:", Lausanne, Suisse : Presse polytechniques et universitaires Romandes, 332 p, (1997).
- [18] A. Kaminski,"Etude des étapes technologiques critiques dans la production des cellules Solaires en silicium multi cristallin", Thèse, INSA de Lyon, 165 p, (1997).
- [19] P. PAPET " Nouveaux concepts pour la réalisation de cellules photovoltaïques à Contacts Inter digités sur substrats minces en silicium cristallin". Thèse doctorat, Lyon, (2007).
- [20] N. Oleksiy, "Simulation, fabrication et analyse de cellules photovoltaïques à Contacts Arrière Inter- digités", thèse doctorat, Lyon, (2005).
- [21] National Center for Photovoltaic NREL. Best Research Cell Efficiencies, (2015).
- [22] A.M. Bagher, M.M.A. Vahid, M. Mohsen "Types Of Solar Cells and Application", American Journal Of Optics and Photonics, 94-113, (2015).
- [23] S. Sharma, K.K. Jain, A. Sharma, " Solar cells: In Research and Application", A Review, Materials Sciences and Applications, 6,1145 -1155,(2015) .
- [24] A.Goetzenberger,J.Knobloch,B. Voss "Crystalline Sillicon Solar Cells ",ISBN:978-0-471-97144-3,(1998).
- [25] R.W.Miles, " Photovoltaic Solar Cells: Choice Of Materials and Production Methods ",Vacuum 80(10),pp.1090-1097,(2006).
- [26] R.Wang, J.Zhao, S.Wenham, M.Green, " 21.5% Efficient Thim Silcom Solar Cell " Progress in Photovoltaics : Research and Applications; Volume 4, pages 55-58,(1996).
- [27] J. H. Petermann,D. Zielke, J.Schmidt,F.Haase,E.G.Rojas, R.Brendel, "19% efficient and

- 43mm-thin crystalline Si Solar cell from layer transfer using porous Silcom", Progress in photovoltaics : Research and Applications, (2011).
- [28] C. Del Canixo "Crystalline Silcom Solar module technology: Towards the 1€ Per Watt-Peak Goal", Progress in photovoltaics : Research and Applications; Volume 17, N 3, page, 199-209, 189, (2009).
- [29] M.A. Green «The path to 25% silicon Solar cell efficiency: History of silicon Cell evolution», Progress in photovoltaics : Research and Applications; Volume 17, N 3, page, 183-189, (2009).
- [30] R. C. Chittik, J. H. Alexander, H. F. Sterling. "The Preparation and Properties Of Amorphous Silicon ", Journal of the Electrochemical Society, 116, 77, (1969).
- [31] D. E. Carlsoo, C. R. Wronski, A. Triano, R. E. Daniel " Cells Using Schottky Barriers On Amorphous Silicon ", Proc. 12th IEEE Photovoltaic Specialists Conf. Baton Rouge 893, (1976).
- [32] P. Zanzucchi, C. R. Wronski, D. E. Carlson, J. " Optical and photoconductive properties Of Discharge produced Amorphous Silicon" Appl. Phys. 48, 5227, (1977).
- [33] Y. Tawada, H. Okamoto and Y. Hamakawa " a-SiC:H/a-Si:H Hetero-junction Solar Cell having More Than 7.1% conversion efficiency" Appl. Phys. Lett., 39(3), 237, (1981).
- [34] T. Ishihara, S. Terazono, H. Sasaki, K. Kawabata, T. Itagaki, H. Morikawa, M. Deguchi, K. Sato, M. Usui, K. Okaniwa, M. Aiga, M. Otsubo and K. Fujikawa " High efficiency triple-junction amorphous solar cells", Proc. 19th IEEE Photovoltaic Specialists Conf. New Orleans, 749, (1987).
- [35] L. Yang, A. Banerjee, K. Lord, S. Guha, " Proc. 2nd World Conf. on Photovoltaic Solar Energy Conversion", Vienna, 387, (1998).
- [36] S. Amtablin, "Du transfert de films minces de silicium monocristallin vers un procédé Cellule à faible budget thermique", l'institut national des sciences appliquées, N° d'ordre -ISAL-0103, (2008).
- [37] Abdo, "Croissance de couches minces de silicium par épitaxie en phase liquide à basse Température pour application photovoltaïque", Thèse de docteur, Institut national des Sciences appliquées de Lyon, Mars, (2007).
- [38] M. P. Stéphane, " Nouvelles architectures distribuées de gestion et de conversion de L'énergie pour les applications photovoltaïques " thèse doctorat, Université de Toulouse, page 10-31, (2009).
- [39] M. Oukachmih, P. Destruel, I. Seguy, G. Ablart, P. Jolinat, S. Archambeau, M. Mabilia, S. Fouet, H. Bock, "New organic disordered materials for photovoltaic conversion ", Solar Energy Materials and Solar Cells, Volume 85, Issue 4, 1 February, Pages 535-543, (2005).
- [40] Loïc Bailly, " Cellules photovoltaïques organiques souples à grande surface ", thèse de Doctorat, Université Bordeaux I, (2010).

- [41] P.Jackson, D. Hariskos, E.Lotter, S.Paetel, R.Wuerz, R.Menner, W.Wischmann, M. Powalla, "New world record efficiency for Cu (In, Ga)Se₂ thin-film solar cells beyond 20% ", progress in photovoltaic: Research and Applications, 19(7): 894-894, November (2011).
- [42] M.A. Green, K. Emery, Y. Hishikawa and W. Warta," Solar cell efficiency tables (Version 31)", Progress in Photovoltaic: Research and Applications, 16, 61, (2008).
- [43] S. Glenis, G. Tourillon; F.Garnier, "Photo electrochemical properties of thin films of polythiophene and derivatives: Doping level and structure effects", Thin Solid Films, 122, 9-17 (1984).
- [44] K. Fouad, " Réalisation étude et réalisation de cellule photovoltaïque organique", Thèse Magister Université des Sciences et de la Technologie d'Oran –Mohamed Boudiaf ,(2012).
- [45] A. Mishra, P. Bäuerle , "Small Molecule Organic Semiconductors on the Move: Promises for Future Solar Energy Technology" , Chem. Int. Ed. 2012, 51, (2020).
- [46] G. Li, R. Zhu, Y. Yang, " Polymer solar cells" ,Nature Photon, 6, 153,(2012).
- [47] M.A. Green, Y. Hishikawa, E.D. Dunlop, D.H. Levi, J. Hohl-Ebinger, M. Yoshita, A.W.Y. Ho- Baillie, Prog. Photovolt. Res. Appl. 27 p. 3, (2019).
- [48] R.S.Roth,"Classification of perovskite and other ABO₃-type compounds" J. Res. Nat. Bur. Stand, 58, 75-88. Repéré à https://nvlpubs.nist.gov/nistpubs/jres/58/jresv58n2p75_A1b.pdf (1957).
- [49] M. K Nazeeruddin, H .Snaith, "Methylammonium lead triiodide perovskite solar cells: A new paradigm in photovoltaic " Mrs Bulletin, 40(8), 641-645, (2015).
- [51] Motta. C, El-Mellouhi . F, Sanvito. S, "Charge Carrier Mobility in Hybrid Halide Perovskites", Scientific Reports, 5, 12746. Repéré à <https://www.nature.com/Articles/srep12746> ,(2015).
- [50] L. M. Herz, " Charge-Crrier Mobilities in Metal halide Perovskites : Fundamental Mechanisms and Limits" ACS Energy Letters, 2(7), 1539-1548, (2017).
- [52] A.Gheno, S.Vedraïne, B.Ratier, J.Bouclé , " π -Conjugated materials as the Hole Transporting layer in perovskite Solar Cells», Metals, 6(1), 21. (2016).
- [53] N. H. Karam et al, "Bandgap Engineering in High Efficiency Multi-junction Concentrator Cell", NREL ET Spectrolab, (2005).

Chapitre : II
Propriétés des matériaux photovoltaïques des cellules solaires en couches minces

II.1. Introduction sur les matériaux photovoltaïques

La conversion photovoltaïque est effectuée à l'aide de matériaux semi-conducteurs tel que le silicium (Si), le germanium (Ge), le sélénium (Se) ou les composés semi-conducteurs tel que l'arséniure de gallium (GaAs), ou bien le tellurure de cadmium (CdTe). Les cellules solaires de type (GaAs) sont très coûteuses dans leur fabrication et leur utilisation est aujourd'hui limitée aux applications spatiales [1].

Les matériaux photovoltaïques sont situés dans la quatrième colonne de la classification périodique (4 électrons sur la dernière couche) où le silicium est le plus utilisé, dans les colonnes 2, 3, 5 il est sous formes de composés dits (III-V) et (II-VI) qui permettent des liaisons assurant une dernière couche électronique à 8 électrons.

Le choix des matériaux dépend surtout de la largeur de la bande interdite E_g , à cause de la condition quantique $h\nu > E_g$, plus E_g est faible, plus le nombre de photons utilisables sera grand mais aussi plus faible sera la photo-tension [2]. Le tableau [II.1] montre l'énergie de gap de différents matériaux photovoltaïques.

Matériau	InSb	InAs	Ge	CIS	c-Si	GaAs	CdTe	a-Si	AIAs	GaP	CdS
Gap (eV)	0.2	0.4	0.6	1.06	1.12	1.43	1.44	1.72	2.2	2.35	2.42

Tableau II.1 : l'énergie de Gap de différents matériaux photovoltaïques [3].

Les meilleurs rendements de conversion à terre (η), définis comme le rapport de la puissance électrique fournie à un circuit extérieur à la puissance reçue du soleil par la cellule [4], seront obtenus si E_g est compris entre 1 et 1,7eV, comme le montre la Figure (II.1).

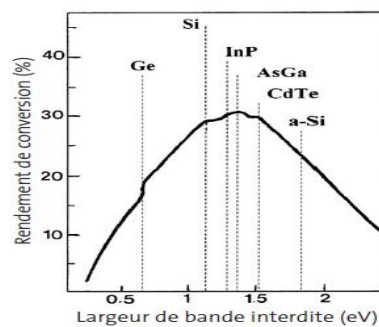


Figure II.1 : Variation du rendement en fonction de la largeur de bande interdite [4].

La technologie des couches minces a toujours été moins chère mais moins efficace que la technologie conventionnelle du (c- Si), Cependant, elle s'est considérablement améliorée au fil des années [5,6]. L'efficacité de la cellule de laboratoire pour le (CdTe) et le (CIGS) dépasse 21% [7,8], surpassant le silicium multi cristallin, le matériau dominant actuellement utilisé dans la plupart des systèmes solaires photovoltaïques. Les tests de durée de vie accélérée des modules à couches minces dans des conditions de laboratoire ont montré une dégradation un peu plus rapide que celle du PV conventionnel, tandis qu'une durée de vie utile de 20 ans ou plus est généralement attendue [9].

Le but de ce chapitre est de présenter les généralités des différentes propriétés cristallographiques, électriques et optiques des matériaux photovoltaïques pour les cellules en couches minces, silicium amorphe hydrogéné (a-Si :H), les matériaux binaire (CdTe, CdS) et le (ZnO). Le choix de ces matériaux est dû au simple fait qu'il s'agit des éléments constituant les cellules photovoltaïques, objet de notre thèse. Nous évoquerons également l'intérêt et les limites de ces matériaux pour les applications photovoltaïques.

II.2. Le silicium amorphe

II.2.1. Description générale du matériau

Le silicium amorphe hydrogéné (a-Si :H) est composé d'atomes de silicium qui sont en configuration désordonnée, et d'atomes d'hydrogène en concentration comprise entre quelques pourcents à plus de 40% [10,11]. Dans ce matériau, les atomes de silicium peuvent être connectés avec d'autres atomes de silicium (1-4) et / ou des atomes d'hydrogène (1-3) sans considérer toutes ses liaisons [l'existence de liaisons pendantes ou présence de liaisons pendante] [12].

Un exemple de configuration de (a-Si :H) est donné sur la figure(II.2). Le silicium amorphe hydrogéné a été fabriqué pour la première fois en 1879 [13], mais ce n'est qu'en 1969 qu'il a suscité un nouvel intérêt. Contrairement au silicium amorphe non hydrogéné, il s'est avéré photoconducteur car il a beaucoup moins de défauts [14]. De plus, il a été montré que l'introduction d'hydrogène dans le matériau permet d'intégrer efficacement les atomes dopants, ce qui est essentiel pour les applications photovoltaïques [15].

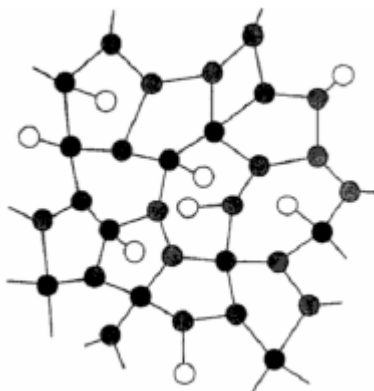


Figure II.2 : Représentation du silicium amorphe hydrogéné. Les atomes de silicium sont représentés en noir et les atomes d'hydrogène en blanc [16].

La structure du silicium amorphe a un effet direct sur ses propriétés électroniques et optiques. La structure de la bande d'énergie du silicium amorphe est décrite par la densité des états d'énergie disponibles. On distingue un état local (dans les queues de bande) où les porteurs se déplacent à peine, et un état étendu où les électrons participent à la conduction. La Figure (II-3) représente la distribution des états d'énergie dans le silicium amorphe. La présence des états d'énergie localisés définit un gap de mobilité supérieure au gap optique. Dans la pratique, la différence entre les deux gaps est faible, divergeant de 0,1 eV maximum. Les défauts profonds correspondent aux liaisons pendantes non passivées et représentent aussi bien des états donneurs qu'accepteurs.

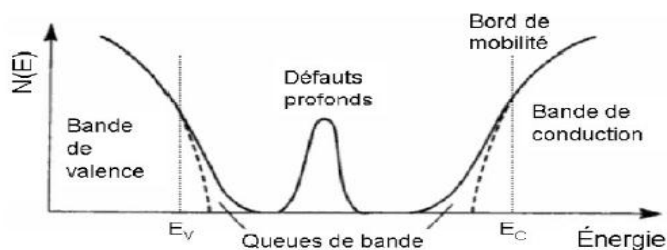


Figure II.3: Répartition de la densité d'états d'énergie dans le silicium amorphe hydrogéné [17].

Cette répartition des états d'énergie permet de considérer le silicium amorphe comme un semi-conducteur à gap direct. Lorsque l'énergie est supérieure à 1,7 eV, son coefficient d'absorption est supérieur à celui du silicium cristallin, de sorte que quelques micromètres du silicium amorphe (a-Si:H) absorbe 90% du spectre solaire utile. Selon le type de silicium amorphe, le gap optique est compris entre 1,7 eV et 1,8 eV [17,18].

II.2.2. Propriétés électriques du silicium amorphe

D'un point de vue électrique, les propriétés du silicium amorphe hydrogéné (a-Si :H) sont médiocres par rapport au silicium cristallin, le silicium amorphe hydrogéné (a-Si :H) intrinsèque, la mobilité des électrons varie de 10 à $20 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ et celle des trous de 1 à $5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$.

Les longueurs de diffusion ne dépassent pas le micron, à cela s'ajoute le caractère métastable du (a-Si :H) sous éclairage, plus connu sous le nom d'effet (Staebler-Wronski) [19], La lumière peut provoquer des changements structuraux et photoélectriques, entraînant une diminution de la conductivité électrique. Cet effet est réversible, il peut être éliminé par recuit à $150 \text{ }^\circ\text{C}$. Concernant les cellules photovoltaïques en (a-Si :H), on parle de rendement initial ou stabilisé suivant que l'on considère la cellule avant ou après la dégradation par l'effet (Staebler-Wronski).

II.2.3. Propriétés optiques du silicium amorphe

Le coefficient d'absorption du silicium amorphe hydrogéné est lié à la distribution exponentielle des états locaux, par conséquent, on peut s'attendre à ce que le coefficient d'absorption varie avec la couche à l'étude sur la figure (II.4), le coefficient d'absorption d'une couche de silicium amorphe standard à 300 Kelvin (le gap de la couche standard est de $1,7 \text{ eV}$) est comparé au coefficient d'absorption du silicium cristallin.

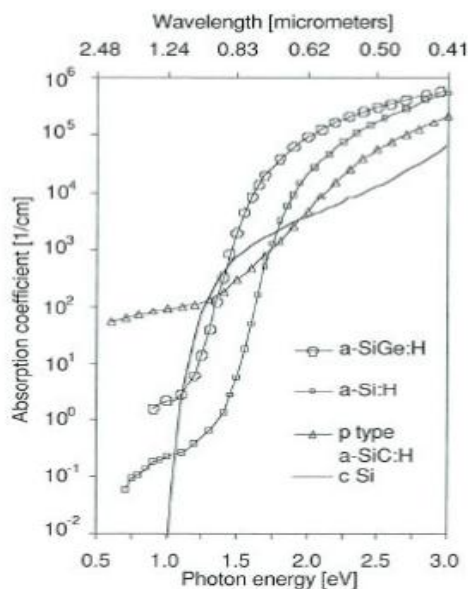


Figure II.4 : Coefficients d'absorption du silicium amorphe et du silicium cristallin en fonction de l'énergie [17].

Nous remarquons que la valeur du coefficient d'absorption du (a-Si:H) est plus élevée que celle du c-Si entre 1,8 eV et 2,4 eV, ce qui permet d'envisager l'utilisation de couches amorphes de plus faible épaisseur pour les applications photovoltaïques. Néanmoins le spectre solaire "utile" est réduit par rapport au cristallin.

II.2.4. Dopage du silicium amorphe

Les premières recherches sur le silicium amorphe remontent au début des années soixante. Ces études font suite à l'intérêt croissant pour les semi-conducteurs amorphes. Les premiers dépôts effectués ont montré une forte densité de défauts profonds (de l'ordre de 10^{19} Cm^{-3}) dans le silicium amorphe, ce qui a empêché son dopage et en même temps réduit les propriétés électroniques (photoconductivité, mobilité des porteurs). En raison de cette densité élevée de défauts profonds, le niveau de Fermi est toujours bloqué et les atomes dopants introduits ne sont pas actifs. Le silicium amorphe peut être dopé en introduisant de l'hydrogène. En fait, l'hydrogène atomique sature les liaisons pendantes, ce qui fait chuter la densité des défauts profonds jusqu'à quelques 10^{15} Cm^{-3} pour un bon silicium amorphe hydrogéné. La concentration d'hydrogène dans le silicium amorphe hydrogéné varie de 6 % à 35 % car son niveau final dépend du substrat, du plasma, du dopage, de la température de dépôt et des éventuels recuits.

Spear et Comber ont réussi en 1975 à doper le silicium amorphe hydrogéné avec du phosphore (type n) et du bore (type p) [20]. Depuis, le silicium amorphe est devenu un matériau utile car il peut être intégré dans des dispositifs classiques (jonctions p-n, transistors).

Carlson, a produit les premières cellules solaires à base de silicium amorphe hydrogéné en 1976, avec un rendement de conversion allant de 2% à 2,5% [21]. Il est intéressant de noter que le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) est intrinsèquement légèrement de type n puisque le niveau de Fermi est plus proche de E_C que de E_V [22]. Un micro-dopage de type p permet donc de réduire légèrement la quantité de défauts profonds [23]. Les mécanismes de dopage du (a-Si:H) sont détaillés dans la référence [24].

II.2.5. Avantages et désavantages

Ce matériau a de nombreuses applications possibles: cellules photovoltaïques (diodes p-i-n ou cellules à hétérojonction), matrices d'adressage pour écrans plats TFT-LCD, les détecteurs optoélectroniques à bas coût (diodes p-i-n), détecteurs de rayonnement le (a-Si :H) a une bonne résistance aux radiations, la structure du dispositif est aussi de type diode p-i-n).

Cependant, les performances électroniques du silicium amorphe ne sont pas aussi bonnes que celles du silicium cristallin. Les conductivités atteintes pour les (a-Si :H) de type n et p sont bien inférieures à celle du (c-Si) même si des valeurs de conductivité allant jusqu'à $10^{-2} (\Omega^{-1} \text{Cm}^{-1})$ peuvent être atteintes avec du silicium amorphe hydrogéné dopé.

Des problèmes de métastabilité ont aussi été observés dans le silicium amorphe hydrogéné. Cette métastabilité peut être induite par différents phénomènes comme l'illumination, le passage d'un courant, l'application d'une tension, le bombardement de particules etc. La création de défauts suite à l'illumination (Effet Staebler- Wronski) est le plus connu [19].

II.3. Le tellure de cadmium (CdTe)

II.3.1. Description générale du matériau

Le (CdTe) est un composé binaire défini de masse molaire 240g.mole^{-1} formé d'un élément métallique, le cadmium ($Z=48, 4d^{10}5s^2$) et d'un élément semi-métallique, le tellure ($Z=52, E_g = 0.33 \text{ eV}$ [25], $4d^{10}5s^25p^6$). Ses principales caractéristiques optoélectroniques ainsi qu'un exemple de configuration de (CdTe) sont présentés dans le tableau (II.2) et la figure (II.5). Dans les semi-conducteurs II-VI, le composé a un numéro atomique élevé, ce qui fait que le coefficient d'absorption des photons est grand et la bande interdite est de 1,5 [26], qui est très approprié pour la spectroscopie solaire.

Ces caractéristiques font de ce matériau non seulement dans le domaine photovoltaïque mais également utilisé pour absorber plus de rayonnement à haute énergie (comme les rayons X), c'est un bon matériau candidat, notamment pour l'imagerie médicale.

Propriétés	Valeur	Références
Constante diélectrique relative (Extrapolation aux hautes fréquences)	7.1	[30]
Largeur de bande interdite E_g à 300k	$1.5\text{eV} \pm 0.01\text{eV}$	Monocristal [28] , poly cristal [29]
Affinité électronique	4.28 eV	[27]
Coefficient d'absorption (600 nm)	6.10^4Cm^{-1}	[28.29]
Mobilité des électrons	$500\text{-}1000\text{ cm}^2/\text{V.s}$	[31]
Mobilité des trous	$50\text{-}100\text{ cm}^2/\text{V.s}$	[31]
Longueur de la liaison Cd-Te	2.806Å	
Paramètre de la maille (300K)	6.481 Å	[32]

Tableau II.2 : Principales propriétés optoélectroniques du (CdTe) [27].

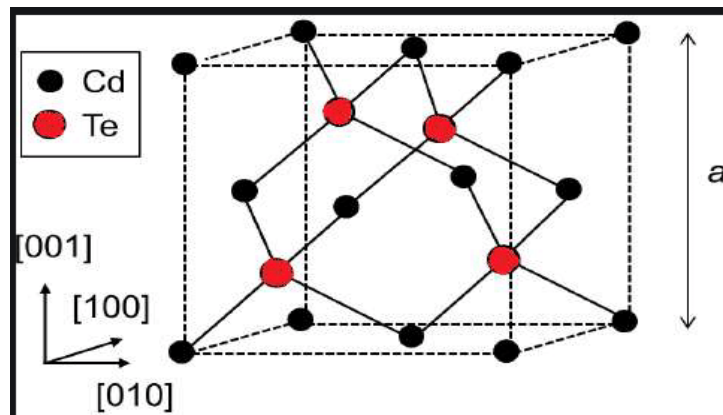


Figure II.5 : Représentation du tellure de cadmium (CdTe). Les atomes de cadmium Cd sont représentés en noir et les atomes de tellure en rouge [33].

II.3.2. Propriétés électriques tellure de cadmium

La structure de bande du (CdTe) présente une bande d'énergie interdite (BI) de largeur E_g séparant la bande de valence quasiment remplie d'électrons de la bande de conduction quasiment vide. Le niveau de Fermi noté E_f est défini comme l'énergie à laquelle la probabilité théorique

d'occupation par les électrons est de 0,5 eV. Par analogie avec les métaux, ce niveau est identifié avec le travail de sortie électronique ϕ_{sc} qui correspond à l'énergie minimale nécessaire pour faire passer un électron du solide au vide immédiatement adjacent. La figure (II.6) représente les diagrammes énergétiques du (CdTe) dans les cas d'un matériau intrinsèque, dopé *n* et dopé *p*. L'affinité électronique notée (χ_{CdTe}), est définie comme la différence d'énergie entre le bas de la bande de conduction et le vide. Pour les matériaux intrinsèques, le niveau de Fermi est au milieu de la bande interdite, le dopage de type *n* le déplace vers la bande de conduction et le dopage *p* le rapproche de la bande de valence.

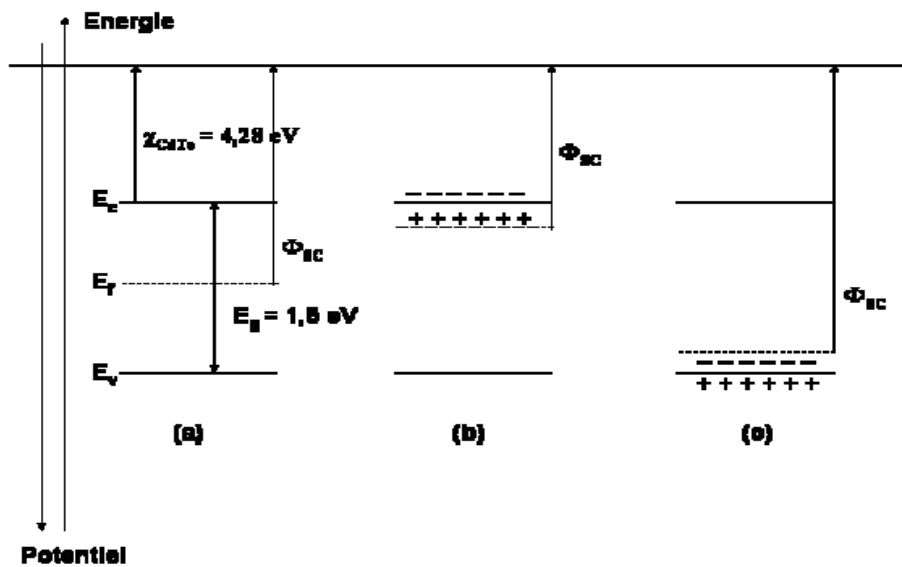


Figure II.6 : Représentation schématique des diagrammes d'énergie dans les cas d'un matériau intrinsèque (a), dopé n (b) et dopé p (c) [33].

II.3.3. Propriétés optiques tellurure de cadmium.

Le (CdTe) est transparent à certaines longueurs d'onde (dans l'infrarouge) [34], et il émet une fluorescence à une longueur d'onde de 790 nm. Si la taille du cristal est réduite à quelques nanomètres (ou moins), c'est-à-dire ses caractéristiques de point quantique, le pic de fluorescence entrera dans la gamme visible à ultraviolet.

II.3.4. Dopage tellurure de cadmium

Le dopage peut se faire de deux manières différentes: la première consiste à introduire des impuretés avec un ou plusieurs électrons en excès (dopage de type *n*) ou un ou plusieurs électrons de valence (dopage *p*) dans le matériau. Dans le premier cas un niveau donneur E_D à

une énergie proche du bas de la bande de valence est créé. Dans le deuxième cas, un niveau accepteur E_A est formé au voisinage de la bande de valence. Le dopage peut être également lié à un écart à la stoechiométrie. Ainsi la présence d'un excès de cadmium en sites interstitiels ou de lacunes anioniques produira un dopage de type n, tandis qu'un excès de tellure à former un semi-conducteur de type p.

II.4. Le sulfure de cadmium (CdS)

II.4.1. Description générale du matériau

Le (CdS) est un semi-conducteur composé (II-VI) En raison de ses bonnes propriétés optiques, électriques et structurales, le (CdS) a reçu une large attention ces dernières années, ce qui le rend largement utilisé comme couche dans diverses hétérojonctions. Tampons minces pour cellules solaires photovoltaïques, tels que: (CdS/CdTe), (CdS/CuInSe₂) [35].

D'un point de vue cristallographique, les couches minces sont connues pour leur polymorphisme, et elles peuvent avoir deux structures possibles: une structure cubique ou une structure hexagonale. Ce phénomène est favorisé par la croissance dans les solutions [36], donc il se cristallise sous structures (Wurtzite) et (Zinc-blende). Dans les conditions ambiantes, la structure la plus stable est la structure (Wurtzite). La structure Zinc-blende ne peut être stable que par la croissance sur des substrats cubiques [37]. Figure II.7 : (a) structure cubique (zinc-blende) et (b) structure hexagonale (Wurtzite).

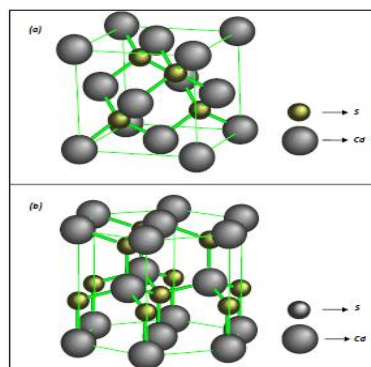


Figure II.7 : Structure du composé (CdS). **(a -zinc blende), (b - Wurtzite)** [37].

II.4.2. Propriétés électriques de sulfure de cadmium

Le sulfure de cadmium (CdS) est un semi-conducteur, naturellement de type n. Ces propriétés photoélectriques étant adaptées aux dispositifs photo luminescents en détection optique (VIS et IR), ce matériau a également fait l'objet d'une attention particulière, en raison de son large gap

direct [38-40]. La bande interdite est de l'ordre de 2,4 eV, lui permet des transitions verticales entre la bande de valence et la bande de conduction peut changer de 2 eV à 3.8 eV selon les conditions de dépôt, l'énergie de gap change avec la taille des cristallites [41].

La résistivité convenable pour un usage photovoltaïque (entre 1 et 100Ω.Cm) pour des couches minces de (CdS) d'épaisseur variant entre 1 et 4(μm) ne peut être obtenue qu'après dopage ou un recuit thermique adéquat. Certes, les propriétés électriques des couches minces de (CdS) sont liées aux paramètres d'élaboration. Dans le cas des couches minces de (CdS) déposées selon le procédé de dépôt par bain chimique (CBD), la résistivité électrique est généralement très grande à cause de la très faible épaisseur des couches élaborées, elle peut atteindre des valeurs dépassent ($10^5 \Omega \cdot \text{Cm}$) [42].

Dans l'obscurité, la résistivité du film (CdS) est très élevée, ce qui peut être attribué à la stoechiométrie obtenue par le film. Selon Yadav et al. [43], la résistivité de la couche mince de type n produite par pyrolyse par pulvérisation à une température de 350 ° C est d'environ ($1.58 \cdot 10^{16} \Omega \cdot \text{Cm}$).

II.4.3. Propriétés optiques de sulfure de cadmium

Les propriétés optiques les plus communément rapportées sont: la transmission et l'absorption optiques. A partir de la littérature, les films (CdS) ont une transparence optique très élevée variant entre 60 et 90%, dans les régions visibles du spectre solaire (520-850) nm, ce qui permet de les utilisés comme des couches fenêtres dans les cellules solaires (cellules photovoltaïques). Cependant, ces films sont uniformes, ont une forte adhérence et une excellente transmission dans le spectre visible [44]. La transmission est liée directement à l'épaisseur, au gap optique et à la structure du film [45]. Le gap diminue de 2.46 à 2.4 eV avec l'augmentation de l'épaisseur de film de 26 à 95 nm [46] Cette diminution du gap est due à l'influence de divers facteurs tels que la taille des grains, les paramètres structuraux, la concentration des porteurs, la présence des impuretés, et décalage de la stoechiométrie du film et la diminution de la contrainte du réseau [47].

II.5. L'oxyde de zinc (ZnO)

II.5.1. Description générale du matériau

L'oxyde de zinc est appelé (zincite) à l'état naturel et cristallisé dans une structure hexagonale compacte de type (Wurtzite). Les atomes de zinc et d'oxygène sont situés dans la position spéciale (Wyckoff 2b) du groupe spatial ($P6_3mc$).

Zn : 0, 0, 0 ; $1/3, 2/3, 1/2$

O : 0, 0, μ ; $1/3, 2/3, \mu+1/2$ avec $\mu=0,375$

Les atomes d'oxygène sont disposés suivant un réseau hexagonal (La maille élémentaire comprend deux côtés $a=b$ séparés par un angle de 120° et les atomes de zinc occupent la moitié des positions interstitielles tétraédriques ayant les mêmes arrangements que les atomes d'oxygène. La structure (Wurtzite) contient quatre atomes par maille dont les positions sont :

O : (0, 0, 0) ; $(2/3, 1/3, 1/2)$ et Zn : $(0, 0, 3/8)$; $(2/3, 1/3, 7/8)$.

Chaque atome de zinc est entouré de 4 atomes d'oxygène situés au sommet d'un tétraèdre et vice versa figure (II-8). La maille hexagonale de la structure Wurtzite se caractérise par trois constantes de réseau **a**, **c** et **u** ; **a** étant le côté d'un losange constituant la base, **c** le côté parallèle à l'axe oz et **u** est une coordonnée intérieure le long de cet axe. Ces constantes déterminent la position relative des sous-réseaux de l'anion O^{2-} et du cation Zn^{+2} .

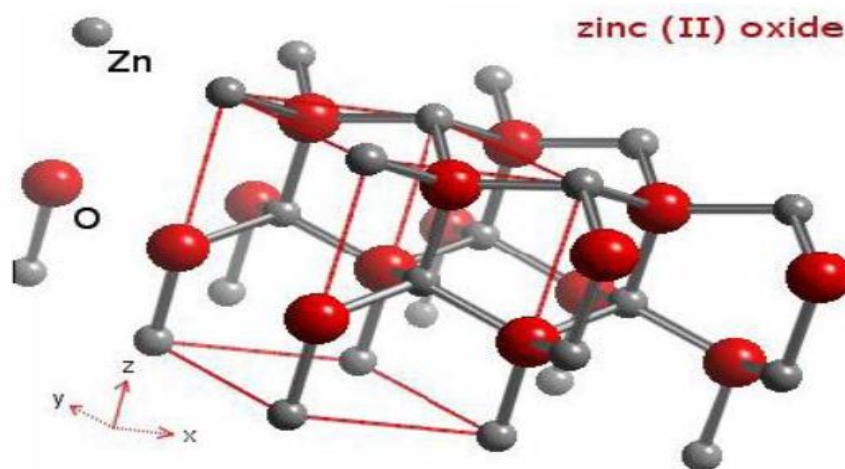


Figure II.8: Structure cristallographique du (ZnO) (Wurtzite) [48].

Dans le tableau [II.3], on présente un récapitulatif de quelques caractéristiques structurales de l'oxyde de zinc. D'après les valeurs des rayons ioniques du cation et de l'anion indiquées dans le tableau, on peut remarquer que la structure est relativement ouverte. En effet, les atomes de zinc et d'oxygène n'occupent que 40% du volume du cristal [49], laissant des espaces vides de rayon 0.95Å. Dans certaines conditions, des atomes de zinc en excès peuvent rester dans ces espaces, c'est-à-dire en positions interstitielles. Cette caractéristique permet d'expliquer certaines propriétés spécifiques des oxydes, qui sont liées à la semi-conductivité, à la photoconductivité, à la luminescence et aux propriétés catalytiques et chimiques des solides.

Réseau	hexagonal Würtzite	
1.6019 Paramètres de mille	A=3.2499 Å	c/a=
	C=5.2060 Å	
Å Distance entre O ⁻² et Zn ⁺² , (Les plus proches voisins)	Suivant l'axe c	d=1.96
	Pour les trois autres	d=1.98 Å
neutre= 0.66 Å Rayon ionique pour une coordination tétraédrique	Liaison covalente	Zn neutre = 1.31 Å O
O ⁻² =1.38Å	Liaison ionique	Zn ⁺² =0.60 Å
Rayon cristallin pour une coordination tétraédrique		Zn ⁺² =0.74 Å
		O ⁻² =1.24Å

Tableau II.3 : Les caractéristiques importantes de l'oxyde de zinc [49].

Trois phases cristallographiques différentes existent pour le (ZnO) : la phase B4 (Würtzite), la phase B3 (Zinc blende) et la phase B1 (Roksalt) figure (II.9). La structure hexagonale Würtzite est thermodynamiquement stable à température ambiante. La structure Zinc blende (cubique) est observée lorsque (ZnO) est déposé sur certains substrats de symétrie cubique.

Alors que la structure Rock Salt (type NaCl) est obtenue lorsqu'une pression hydrostatique (10-15 GPa) est appliquée sur la structure Wurtzite. Cette dernière est métastable et peut persister atmosphérique.

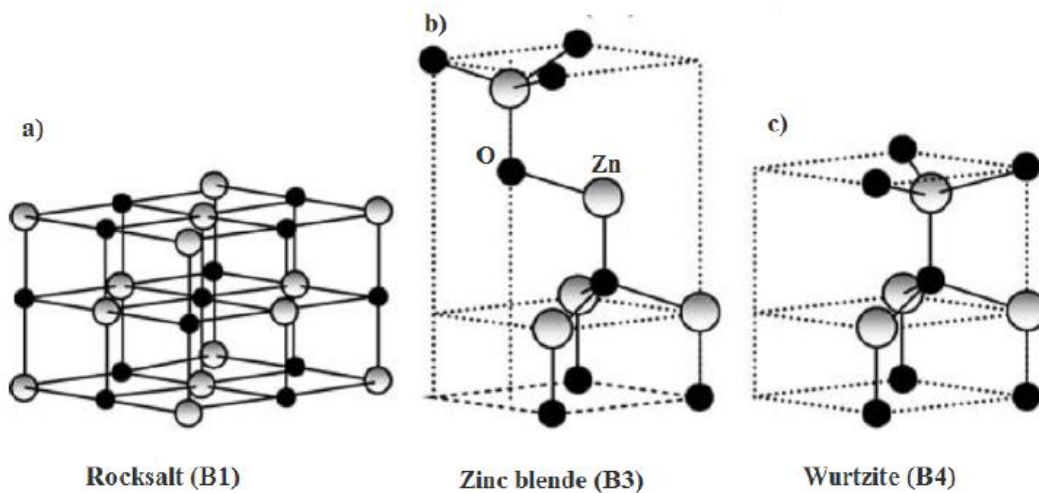


Figure II.9: Structure cristalline de (ZnO) en phase a) (NaCl) ; b) Zinc blende ; et c) wurtzite. d'après Ozgur et al [50].

II. 5.2. Propriétés électriques de L'oxyde de zinc

L'oxyde de zinc (ZnO) est un semi-conducteur dégénéré de type n. La conductivité élevée de la couche d'oxyde pur est attribuée à la forte concentration de porteurs (électrons) car la mobilité dans ces couches est bien inférieure à celle du matériau correspondant. La concentration élevée d'électrons est due à des écarts par rapport à la stœchiométrie (ou à des défauts de structure). Il y a une certaine anomalie dans la littérature concentrant l'énergie du gap de (ZnO). Srikant et Clarke [51] annoncent que ce gap à température ambiante est de 3.3 eV ; tandis qu'une bande de valence à la transition de niveau de donneur à 3.15eV explique le fait qu'une petite valeur (typiquement 3.2eV) est souvent rapportée. Ainsi, le gap à température ambiante du (ZnO) est compris entre 3.2 et 3.3eV.

Une conductivité élevée ($> 5.10^3 \Omega^{-1} \text{Cm}^{-1}$) est possible dans le (ZnO) de type n, en raison des défauts intrinsèques, des dopants (Al, In, Ga, B, F) ou en combinaison [52].

Les mobilités des électrons dans des couches minces de (ZnO) rapportées, sont typiquement de l'ordre de 20 à 30 $\text{Cm}^2/\text{V.s}$. En outre, la mobilité maximale obtenue dans les cristaux simples de (ZnO) est de l'ordre de ($\sim 200 \text{ Cm}^2/\text{V.s}$). La conductivité de type p a été obtenue pour la première fois par Aoki et al. En 2001 [53]. Les structures de bandes électroniques de l'oxygène et du zinc sont :

(O : $1s22s22p4$, Zn : $1s22s22p63s23p63d104s2$).

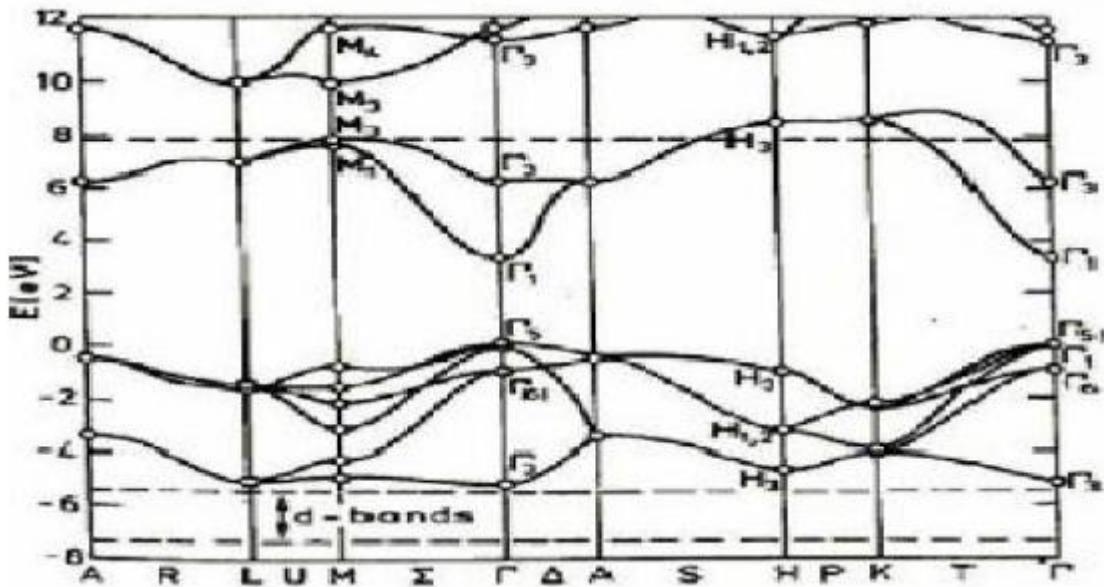
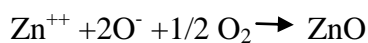


Figure II.10: Structure de bande du (ZnO) (la référence zéro correspond au maximum d'énergie de la bande de valence) [54].

Les états 2p de l'oxygène forment la bande de valence et les états 4s du zinc constituent la bande de conduction du semi-conducteur (ZnO). Donc pour former une liaison ionique l'atome de zinc doit céder ces deux électrons de l'orbitale 4s à un atome d'oxygène qui aura par la suite une orbitale 2p pleine à 6 électrons.

La réaction de formation (stœchiométrie) est la suivante :



La figure(II.10) illustre l'allure de la structure de la bande du (ZnO). Dans cette structure il existe en réalité six bandes Γ résultantes des états 2p de l'oxygène, et les plus bas des bandes de

conduction ont une forte contribution des états 4s du Zinc. Cette figure indique que c'est un semi-conducteurs à gap direct vu le minimum de la bande de conduction et la maximum de la bande de valence sont situés au même point Γ . Quant à sa conductivité, le (ZnO) stœchiométrique est isolant, mais en raison de défauts du système (tels que des lacunes d'oxygène et des atomes de zinc) en position interstitielle, il devient dégénéré de type n. La valeur de l'écart de température (ZnO) peut être de 3,37 eV [55].

II.5.3. Propriétés optiques de L'oxyde de zinc (ZnO)

L'oxyde de zinc est un matériau transparent dans le domaine du visible grâce à son large gap, ce qui lui permet d'être classé parmi les oxydes transparents conducteurs TCO (transparent conductive oxide) lorsqu'il dopé. Ce matériau est susceptible de laisser passer la lumière visible jusqu'à 90%.

Du fait de l'anisotropie de sa structure cristalline hexagonale, la lumière se propageant dans un cristal de (ZnO) sera soumise au phénomène de la biréfringence optique. La propagation de la lumière aura lieu dans ce cas selon deux directions. Ainsi, elle se propagera d'une part suivant la première direction avec une polarisation parallèle à l'axe optique du cristal (l'axe c) avec un indice de réfraction ordinaire noté (n_o). D'autre part, elle se propagera suivant la seconde direction avec une polarisation perpendiculairement à l'axe optique avec un indice de réfraction t extraordinaire noté (n_e).

La figure (II.11) : montre la dispersion des indices de réfraction de la lumière en fonction de la longueur d'onde.

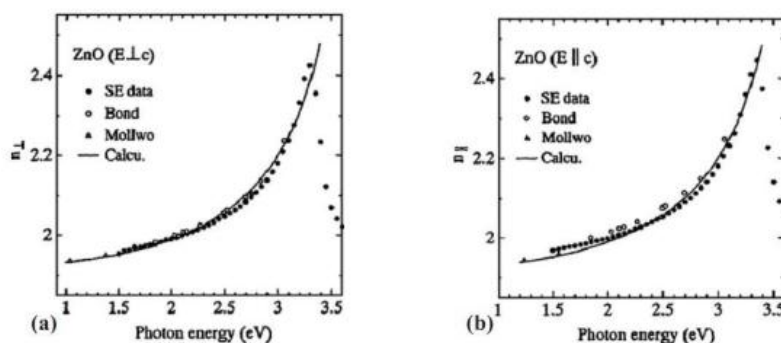


Figure II.11: Dispersion des indices de réfraction n_o (a), n_e (b) [56].

L'indice de de réfraction de l'oxyde de zinc massif est égal à 2.0 [57]. En couches mince de réfraction et son coefficient d'absorption varient en fonction des conditions d'élaboration des couches. L'indice de réfraction a une valeur variant entre 1.7 et 2.2 [58]. En fonction des conditions d'élaboration et de traitements ultérieurs, la luminescence de (ZnO) est

principalement observée dans deux domaines : (l'ultraviolet et le vert). D'autres bandes dans du visible sont quelques fois observées. On peut citer exemple le bleu (2.88eV- 430nm), le jaune (2.2eV-564nm) [58-59] ou le rouge (1.9eV-640nm) [60]. La partie UV du spectre de luminescence (à environ 3.36eV-369nm) correspond à l'exciton [61], tandis que la luminescence visible est due aux défauts qui sont liés aux émissions des niveaux profond, tels que les interstitiels de zinc et les lacunes d'oxygène [62].

II.5.4 Dopage de L'oxyde de zinc

La conductivité peut être encore améliorée en utilisant le mécanisme de dopage d'éléments du groupe III tels que l'aluminium (Al), le gallium (Ga) et l'indium (In). Pour le dopage substitutionnel, ces atomes dopants remplaceront les atomes de zinc dans son réseau atomique. Deux électrons de leur orbitale externe vont être utilisés pour la liaison ionique avec les atomes d'oxygène et les électrons restants de cette orbitale externe vont être cédés à la bande de conduction. Des dépôts par pulvérisation cathodique de films (ZnO) dopés indium (IZO) montrent d'après le tableau [II.4] que la conductivité augmente avec la concentration des atomes dopants et par conséquent une faible résistivité de ($3.36 \times 10^{-4} \Omega\text{cm}$) a été atteinte pour le dopage le plus élevé [63].

Échantillon	$\rho[\Omega\text{cm}]$	$n[\text{cm}^{-3}]$	$\mu[\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}]$
ZnO	$1,10 \times 10^{-1}$	$1,61 \times 10^{18}$	31,2
ZnO:In à 15%	$6,19 \times 10^{-3}$	$9,17 \times 10^{19}$	11,1
ZnO:In à 20%	$1,27 \times 10^{-3}$	$5,63 \times 10^{20}$	8,7
ZnO:In à 25%	$3,36 \times 10^{-4}$	$3,52 \times 10^{21}$	4,9

Tableau II.4 : Propriétés électriques de films (ZnO) purs dopés indium à température ambiante [63].

De même, une étude comparative des propriétés structurales, électroniques, optiques et électriques de couches (ZnO) dopées respectivement d'aluminium, gallium et indium a mis en évidence l'amélioration significative des films (AZO) dans la réduction de la résistivité ($8.54 \times 10^{-4} \Omega\text{cm}$) par rapport à (GaZO) et (IZO) et de la transparence dans la région du visible [64].

Il est également possible d'utiliser des dopants appartenant au groupe (VII) du tableau périodique des éléments tel que le fluor. Dans ce cas, les atomes dopants vont remplacer les atomes d'oxygène du réseau atomique de (ZnO). Parmi ces différents dopants, l'aluminium se révèle être de meilleur dopant car il produit des films avec une grande conductivité et une transparence élevée par rapport à tout autre dopant. Des recherches s'effectuées par Igsaki et al ont prouvé que le dopage de type n du (ZnO) améliore, non seulement sa transparence et sa conductivité, mais aussi sa stabilité thermique [65].

II.6. Références

- [1] S. abada, " Etude et optimisation d'un générateur photovoltaïque pour la recharge d'une Batterie avec convertisseur SEPIC ", Québec, (2011).
- [2] S. Martinuzzi, " Les cellules solaires au silicium cristallin", Dossier Photovoltaïque, (2007).
- [3] H. Mathieu, " Physique des semi-conducteurs et composant électronique", 2^{ieme} édition Masson, paris, (1990).
- [4] M. Orgeret, " Les Piles Solaires, le Composant et ses Applications", Paris : Masson, (1985).
- [5] A. Goetzberger, C. Hebling , H.W. Schock, "Photovoltaic materials, history, status and Outlook ", Materials Science and Engineering 40, 1- 46,(2003).
- [6] C. Sorrel, S. Sugihara, j. Nowotny, "Materials for Energy Conversion Devices (Woodhead Publishing Limited) ", England (2005).
- [7] D. Lincot, " Où en est la conversion photovoltaïque de l'énergie solaire" ,CNRS, Institut Photovoltaïque ,d'Ile-de-France, numéro **93**,23 octobre (2018).
- [8] K.Maraun , A. Yamiya "Solar Frontier Achieves World Record Thin-Film Sola Cell Efficiency: 22.3% ", <http://www.solar-frontier.com/eng/news/2015/C051171.html>,(2015).
- [9] Q. Mauguit," les cellules photovoltaïques, cœur des panneaux solaires", Revue scientifique. Futura sciences ,15-33, (2013).
- [10] R.A. Street, "Hydrogenated amorphous silicon ", Cambridge University Press, (1991).
- [11] H. Fujiwara, Y. Toyoshima, M. Kondo and A. Matsuda, " Interface-layer formation Mechanism in a-Si: H thin-film growth studied by real-time spectroscopic ellipsometry and Infrared spectroscopy ", Physical Review B, vol. 60, p. 13598, (1999).
- [12] W. Favre, "Silicium de type n pour cellules à hétérojonction : caractérisations et modélisations", Université Paris Sud - Paris XI, (2011).

- [13] J. Ogier, " Sur la formation thermique de l'hydrogène silicaté ", Bulletin de la Société Chimique de Paris, p. 116–118, (1879).
- [14] R. C. Chittick, J. H. Alexander , H. F. Sterling , " The Preparation and Properties Of Amorphous Silicon", Journal of Electrochemical Society, vol.116, p. 77, (1969).
- [15] W. Spear , P. Lecomber , " Solid State Communications ", vol. 17, p. 1193, (1975).
- [16] J. D. Lacoste. "Vers une ingénierie de bandes des cellules solaires à hétérojonctions a-Si:H/c-Si. Rôle prépondérant de l'hydrogène ", PHD thèses, Ecole Polytechnique, (2007).
- [17] S. Amtablian , "Du transfert de films minces de silicium monocristallin vers un procédé cellule à faible budget thermique ", l'institut national des sciences appliquée de Lyon, (2008).
- [18] O. Tosoni, " Conception, élaboration et intégration d'électrodes transparentes optimisées Pour l'extraction des charges dans des dispositifs photovoltaïques", PHD thèses, Université de Grenoble, (2013).
- [19] D.L. Staebler , C.R. Wronski, " Reversible conductivity changes in discharge – produced amorphous Si ", Appl. Phys. Lett. **31**, 292, (1977).
- [20] W. E. Spear , P. G. LeComber, "Substitutional doping of amorphous silicon ", Solid State Communication, vol. 17, n°9, p. 1193, (1975).
- [21] D. E. Carlson and C. R. Wronski, " Amorphous Silicon Solar Cells ", Appl. Phys. Lett. **29**, 602 (1976).
- [22] R. A. Street, " Doping and the Fermi Energy in Amorphous Silicon", Physical Review Letters, vol. 49, pages 1187–1190, (1982).
- [23] R. A. Street, D. K. Biegelsen , J. C. Knights, " Defect states in doped and compensated a-Si :H ", Physical Review B, vol. 24, pages 969–984, (1981).
- [24] R.A. Street, "Hydrogenated amorphous silicon", Cambridge University Press, (1991).
- [25] P.Baranski, V. Klotchkov, I. Potykevich, "Electronique des semi-conducteurs", Moscou, (1978).
- [26] K. Mitchell, A. Fahrenbruch, R. Bube, " Photovoltaic determination of optical-absorption coefficient in CdTe", J. Appl. Phys, 48, 829,(1977).
- [27] B. E. McCandless, J.R. Sites, "Handbook of Photovoltaic Science and Engineering", John Wiley and Sons, New York, (2003).
- [28] K. Mitchell, A. Fahrenbruch, R. Bube, "Evaluation of the CdS/CdTe heteojonction solar Cell ", J. Appl. Phys, 48, 4365-4371,(1977).
- [29] A. E. Rakhshani, « Electrodeposited CdTe-Optical Properties » J. Appl. Phys, **81**, (1997),

7988.

- [30] O. Madelung, "Semiconductors Other than Group IV Elements and III-V Compounds", Springer-Verlag, New York, (1992).
- [31] M. Aven, J. Prener, "Physics and Chemistry of II-VI Compounds", John Wiley and Sons, New York,(1967).
- [32] From ASTM x-ray powder data file, card No. 15-770.
- [33] J. Rousset , "Etude du dépôt électrochimique de couches épaisses de tellure de cadmium", Thèse de doctorat de l'université Pierre et Marie Curie (Paris VI),(2007).
- [34] R. Bube, "Temperature dependence of the width of the band gap in several Photoconductors ", Physical Review, 98: 431–3, (1955).
- [35] S. Hariech, "élaboration et caractérisation des films minces chalcogénures a base de Cadmium et de cuivre pour des applications photovoltaïques ", Thèse doctorat (2013).
- [36] M. A. Martinez, C. Guillen, J. Herrero, " Morphological and structural studies of CBD-CdS thin films by microscopy and diffraction techniques", Applied Surface Science 136 , 8- 16, (1998).
- [37] A. Mosbah, "Elaboration et Caractérisation de Couches Minces d'Oxyde de Zinc ", Thèse de Doctorat, Université Mentouri de Constantine,(2009).
- [38] R. Sudharsanan , A. Rohatgi , " Effects Of pre-heat treatment of CdS on MOCVD CdTe/CdS Solar cell performance ", IEEE ,504,(1990).
- [39] A. Sanchez, P.J.Sebastian , O.Gomez-D, Semicond .Sci.Technl.9 87 (1995).
- [40] J.N. Ximello-Quiebras, G.Contreras-Puente, J. Aguilar-Hernandez, G.Santana-Rodriguez, A. Arias-Carbajal Readigos, " Solar Energy Mat", Solar Cells, 82 263 (2004).
- [41] A. AKKARI, " synthèse et caractérisation physico-chimique de couches minces de sulfure D'étain en vue de leur utilisation dans des dispositifs photovoltaïques ", Montpellier: Université de Montpellier II, (2011).
- [42] D. Soubane, " Élaboration et Caractérisation des Films Absorbants I-II-VI2 {CuInSe2, CuInS2, CuIn(S_e,S)₂ et Cu(In,Ga)Se₂}, Film Buffer I-VI CdS et Nano Fenêtre Optique ZnO, Destinés à la Fabrication des Cellules Solaires à Faible Coût de Revient", thèse Dr. en Sci. Univ. Ibn Zohr Agadir- Maroc, (2007).
- [43] A.A. Yadav et al, " Studies on growth and characterization of CdS_{1-x}Sex (0.0≤x≤1.0) Alloy Thin Films by Spray Pyrolysis", Journal of Alloys and Compounds 493 , 179–185,(2010).
- [44] L. Wenyi, C. Xun, C. Qiulong, Z. Zhibin, " Influence of growth process on the

- structural, optical and electrical properties of CBD-CdS films", *Materials Letters*. 59 1-5,(2005).
- [45] G. Hodes, "Chemical Solution Deposition of Semiconductor Films", New York, (2002).
- [46] E. Çetinörgü, C. Gümüş, R. Esen, " Effects Of Deposition Time and Temperature On The Optical Properties Of Air-Annealed Chemical Bath Deposited CdS Films", *Thin Solid Films*. 515 , 1688-1693,(2006).
- [47] A.E. Rakhshani, A.S. Al-Azab, "Characterization of CdS films prepared by chemical-bath deposition ",*J. Phys. Condens. Matter*, 12 ,8745-8755,(2000).
- [48] J. Jousset- Dubien, " Nouveau Traité de Chimie Minérale ", Vol. 5, Masson, Cie, Paris, (1962).
- [49] A.F. Kohn, G. Ceder , D. Morgon , C.G. Van de Walle , " First-principal study of point Defects in ZnO " *Phys. Rev.B.*, 61, 15019 ,(2000).
- [50] K. L. Chopra, S. Major, D. K. Pandya, "Transparent Conductors-A Status Review" ,*Thin Solid Films*, Vol. 102, No. 1, pp. 1-46, (1983).
- [51] V. Srikant, D.R. Clarke, "On the optical band gap of zinc oxide ", *J. App. Phys.*,83, 5447 (1998).
- [52] K.I. Chopra, S. Major , D.K. Pandya," Transparent conducteurs- A status Review" *Thin solid films* 1, 102 (1986).
- [53] T. Aoki, Y. Shimizu, A. Miyake, A. Nakamura, Y. Nakanishi, Y. Hatanaka, "p-Type ZnO Layer Formation by Excimer Laser Doping , *physica status solidi b*, 229, 2, 911(2001).
- [54] W.H. Hirschwald et al, " Zinc Oxide", *Current Topics in Materials Science*, Vol(7), pp. 143-482 (1981).
- [55] Z. Y. Xiao, Y. C. Liu, D. X. Zhao, J. Y. Zhang, Y. M. Lu, D. Z. Shen, X. W. Fan, "Optical property of hexagonal Nano-crystalline ZnO film on Si substrate, prepared by plasma-enhanced CVD", *Journal of luminescence* 122-123 (2007).
- [56] H. Morkoç, Ü. Özgür, "Zinc Oxide: Fundamentals, Materials and Device Technology",*Wiley-VCH Verlag GmbH , Co. KGaA, Weinheim, Germany* , (2009)..
- [57] Ed. R.C. Weast, "Handbook of Chemistry and Physics", 56th Edition, CRS Press (1975).
- [58] E.M. Bachari, G. Baud, S. Ben Amor, M. Jacquet, " Structural and optical properties of sputtered ZnO films",*Thin Solid Films* 165 ,348, (1999).
- [59] C. Jagadish, and S. J. Pearton, "Zinc Oxide Bulk ", *Thin films and nanostructures*, Elsevier (2006).
- [60] J. Petersen, C. Brimont, M. Gallart, O. Crégut, G. Schmerber, P. Gillot, B. Hönerlage, C.

- Ulhaq Bouillet, J. L. Rehspringer, C. Leuvrey, S. Colis, H. Aubriet, C. Becker, D. Ruch, A. Slaoui, and A. Dinia, "Structural and photoluminescence properties of ZnO thin films prepared by sol-gel process", *Journal of Applied Physics* 104 ,113539,(2008).
- [61] G. Changxin, F. Zhuxi, and S. Chaoshu, " Ultraviolet Super-Radiation Luminescence of Sputtering ZnO Film Under Cathode-Ray Excitation at Room Temperature ",*Chinese Physics Letters* 16 ,146,(1999).
- [62] K. Vanheusden, C. H. Seager, W. L. Warren, D. R. Tallant, , J. A. Voiget,« Correlation between photo- luminescence and oxygen vacancies in ZnO phosphors», *Applied Physics Letters* 68403, (1996).
- [63] A. Singh, S. Chaudhary, and D. K. Pandya," High conductivity indium doped ZnO films By Metal target reactive co-sputtering", *Acta Materialia*, 111:1–9, (2016).
- [64] M. Khuili, N. Fazouan, H. Abou El Makarim, G. El Halani, and H. Atmani, "Comparative first principles study of ZnO doped with group III elements", *Journal of Alloys and Compounds*, 688:368–375, (2016).
- [65] B. H. Haslinda, "Fabrication structural and electrical characteristics of zinc oxide (ZnO) thin films by direct current sputtering". Thèse de doctorat, Université des Sciences, Malaysia, (2009).

Chapitre III :
Modèle de simulation (AMPS-1D)

III.1. Introduction

Afin de rendre les systèmes photovoltaïques économiques et adaptés aux applications terrestres à grande échelle, des cellules solaires de rendement élevé faites à bon marché et avec un matériau facilement disponible sont exigées. L'objectif principal est alors d'augmenter au maximum l'efficacité de conversion de telles cellules solaires. Pour cela, nous devons analyser et perfectionner notre compréhension des différents facteurs qui limitent les performances de ces cellules. Ceci peut mieux être réalisé avec l'aide d'un modèle optique capable d'analyser les propriétés de transport dans des dispositifs basés sur de tels matériaux désordonnés.

Il existe différents codes de simulation, à une dimension, des caractéristiques et performances des dispositifs optoélectroniques. Notre choix est tombé sur le logiciel AMPS-1D (Analysis of Microelectronic and Photonic structures), conçu par l'équipe de Fonash, de l'Université de Pennsylvanie [1-3]. Particulièrement adapté à la simulation des cellules solaires à base de silicium amorphe et de poly cristallin.

Ce logiciel est un programme informatique unidimensionnel pour simuler la physique des semi-conducteurs. Il résout numériquement les trois équations du dispositif (l'équation de poisson, équation de continuité pour les trous libres et celle pour les électrons libres) sans faire à priori des suppositions à propos des mécanismes de transport dans ces dispositifs. Il est élaboré pour analyser, concevoir et optimiser des structures projetées pour les applications microélectroniques, photovoltaïques, optoélectroniques [4].

Une comparaison de l'AMPS avec les autres programmes connus montre que l'AMPS est le seul programme disponible qui incorpore toute les caractéristiques suivantes :

- Un traitement de contact qui permet à l'émission thermoïonique et à la recombinaison d'avoir lieu aux contacts de dispositif.
- Un modèle très généralisé d'état de la bande interdite qui peut s'adapter à n'importe quelle densité de distribution des états dans la couche ou à l'interface.
- Les deux recombinaisons: bande- à -bande et Shockley-Read-Hall.
- La statistique complète de Fermi-Dirac et pas seulement celle de Boltzmann.
- Un modèle de la charge piégée qui explique la charge dans n'importe quelle distribution

d'état du gap.

- La mobilité des porteurs qui peut varier avec la position.
- Les affinités des électrons et des trous qui peuvent varier avec la position.
- La capacité de calculer des caractéristiques du dispositif en fonction de la température sous polarisation directe et inverse, aussi bien qu'avec ou sans illumination.
- La capacité d'analyser des structures du dispositif fabriqué en utilisant les matériaux monocristal, les poly cristallins et ou amorphes ou tous les trois à la fois.

III.2. Présentation de modèle électrique du simulateur AMPS-1D

III.2.1. Equation de Poisson et densités de courants

Dans le modèle électrique, il existe trois équations différentielles liées: l'équation de Poisson et les deux équations de la continuité des porteurs de charge sont résolus simultanément à l'état d'équilibre et hors équilibre thermodynamique (c'est-à-dire sous l'effet de tension de polarisation ou la lumière, ou les deux). Les équations utilisées sont [1, 5]:

L'équation de Poisson :

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon} \quad (\text{III.1})$$

L'équation de continuité pour les trous :

$$\frac{1}{q} \frac{\partial J_p(x)}{\partial x} = G(x) - R(p(x), n(x)) \quad (\text{III.2})$$

L'équation de continuité pour les électrons :

$$-\frac{1}{q} \frac{\partial J_n(x)}{\partial x} = G(x) - R(p(x), n(x)) \quad (\text{III.3})$$

La densité de charge effective :

$$\rho(x) = q \left[p(x) - n(x) + p_T(x) - n_T(x) + N_{net}^+ \right] \quad (\text{III.4})$$

Le champ électrique

$$E = - \left[\frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right] \quad (\text{III.5})$$

Ou, $\psi(x)$ la position de l'énergie du niveau du vide (potentiel électrostatique) , E le champ électrique, x la position dans le dispositif, ϵ représente la constante diélectrique, p et n les densités des trous et des électrons dans la bande de valence et de conduction, q la charge électronique, R le taux de recombinaison, G le taux de génération de paires électron-trou, p_T et n_T la densité des trous et des électrons piégés respectivement, N_{net}^+ la densité de dopage effective , J_p et J_n les densités de courant des trous et des électrons respectivement .

Dans nos calculs, l'état d'une cellule est défini par trois variables dépendantes: Le niveau du vide ψ et les quasi-niveaux de Fermi, pour les trous E_{Fp} et pour les électrons E_{Fn} .

Si ces trois variables dépendantes sont connues en chaque position x de la structure, toutes les autres grandeurs, caractérisant le système considéré peuvent être calculées en fonction de la position x .

Sachant qu'à l'équilibre thermodynamique, le niveau de Fermi est constant, en chaque point de la structure, la variable ψ peut être déterminée par la résolution de l'équation de poisson. Cela se fait en considérant les conditions aux limites suivantes :

$$\psi = 0 - \chi(L) - \phi_{bL} + \phi_{b0} + \chi(0) \quad (\text{III.6a})$$

$$\psi(L) = 0 \quad (\text{III.6b})$$

Hors équilibre thermodynamique, le niveau de Fermi se divise en quasi-niveaux de fermi pour les électrons et pour les trous. On obtient, ainsi, un système à trois équations différentielles, non linéaires et couplées. Pour déterminer les grandeurs variables inconnues (ψ, E_{Fp}, E_{Fn}), six conditions aux limites doivent être considérées, deux conditions pour chaque grandeur.

Les deux premières conditions aux limites sont:

$$\psi(0) = 0 - \chi(L) - \phi_{bL} + \phi_{b0} + \chi(0) - V \quad (\text{III.7a})$$

$$\psi(L) = 0 \quad (\text{III.7b})$$

Où L est la longueur du dispositif, ($\chi(0)$, $\chi(L)$) l'affinité électronique à $x=0$ et $x=L$, ϕ_{bL} et ϕ_{b0} les hauteurs de barrière au contact avant et arrière et V est la différence de potentiel appliquée voir figure (III.1). La condition (III.7b) veut dire qu'à la position $x = L$, le potentiel électrostatique est choisi égal à 0. Les conditions imposées sur les densités de courants, au niveau des positions $x = 0$ et $x = L$, donnent les quatre autres conditions aux limites:

$$J_n(0) = qS_{n0} [n(0) - n_0(0)] \quad (\text{III.8a})$$

$$J_p(0) = -qS_{p0} [p(0) - p_0(0)] \quad (\text{III.8b})$$

$$J_n(L) = -qS_{nL} [n(L) - n_0(L)] \quad (\text{III.8c})$$

$$J_p(L) = qS_{pL} [p(L) - p_0(L)] \quad (\text{III.8d})$$

$S_{n0}, S_{p0}, S_{nL}, S_{pL}$ représentent les vitesses de recombinaison pour les électrons et les trous, respectivement à $x=0$ et $x=L$. La valeur la plus élevée que peut avoir la vitesse de recombinaison est de 10^7 cm/s.

$n(0)$ et $p(0)$ sont les densités d'électrons et de trous en $x=0$, respectivement. $n(L)$ et $p(L)$ sont respectivement les densités d'électrons et de trous en $x = L$. $n_0(0)$ et $p_0(0)$, $n_0(L)$ et $p_0(L)$ sont les densités des électrons et des trous à l'équilibre thermodynamique en $x=0$ et $x=L$. En tenant compte les conditions précédentes, les équations (III-1), (III-2) et (III-3) sont résolues simultanément pour déterminer : $\psi = \psi(x)$,

$$E_{Fn} = E_{Fn}(x) \text{ et } E_{Fp} = E_{Fp}(x).$$

III.2.2. Densité de porteurs libres

III.2.2. A. A l'équilibre thermodynamique

La densité des trous libres, à l'équilibre thermodynamique, est donnée par :

$$p_0(x) = N_V(x) \exp \left[-\frac{\{E_{F0} - E_V(x)\}}{KT} \right] \quad (\text{III.9})$$

Nous avons représenté sur la figure (III-1), un diagramme énergétique type, pour une structure p-i-n, à l'équilibre thermodynamique.

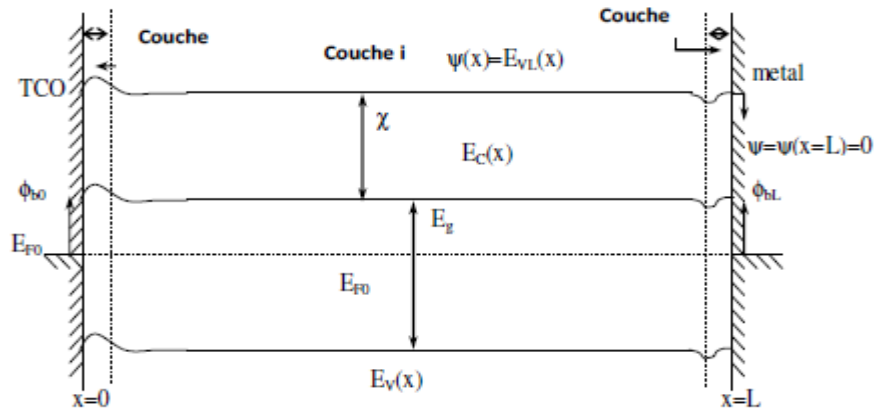


Figure III.1 : Diagramme des bandes d'énergies. Pour une structure p-i-n à l'équilibre Thermodynamique [1,5].

D'après la figure III-1.

$$E_{F0} = \psi(L) - \chi(L) - \phi_{bL} \quad (III.10)$$

Sachant que $\psi(L) = 0$, en en déduit :

$$E_{F0} = 0 - \chi(L) - \phi_{bL} \text{ et } E_V(x) = \psi(x) - \chi(x) - E_g(x) \quad (III.11)$$

De (III.10), (III.11) devient :

$$p_0(x) = N_V \exp \left[- \frac{\{0 - \chi(L) - \phi_{bL} - \psi(x) + \chi(x) + E_g(x)\}}{KT} \right] \quad (III.12)$$

Il en est de même pour les électrons :

$$n_0(x) = N_C \exp \left[-\frac{\{E_C(x) - E_{F0}\}}{KT} \right] \quad (\text{III.13})$$

Sachant que :

$$E_C(x) = \psi(x) + \chi(x) \quad (\text{III.14})$$

A partir de (III-10) et (III-14), l'équation (III -13) devient :

$$n_0(x) = N_C \exp \left[-\frac{\{\psi(x) + \chi(x) - 0 - \chi(L) - \phi_{bL}\}}{KT} \right] \quad (\text{III.15})$$

Finalement les équations (III -12) et (III -15) donnent les expressions des densités des porteurs libres à l'équilibre thermodynamique.

III.2.2.B. Hors équilibre thermodynamique

A l'état hors équilibre thermodynamique le niveau de fermi se divise en deux quasi niveaux fermis , E_{Fn} et E_{Fp} , Figure (III.2). Par conséquent les expressions pour les trous et les électrons libres prennent les formes suivantes :

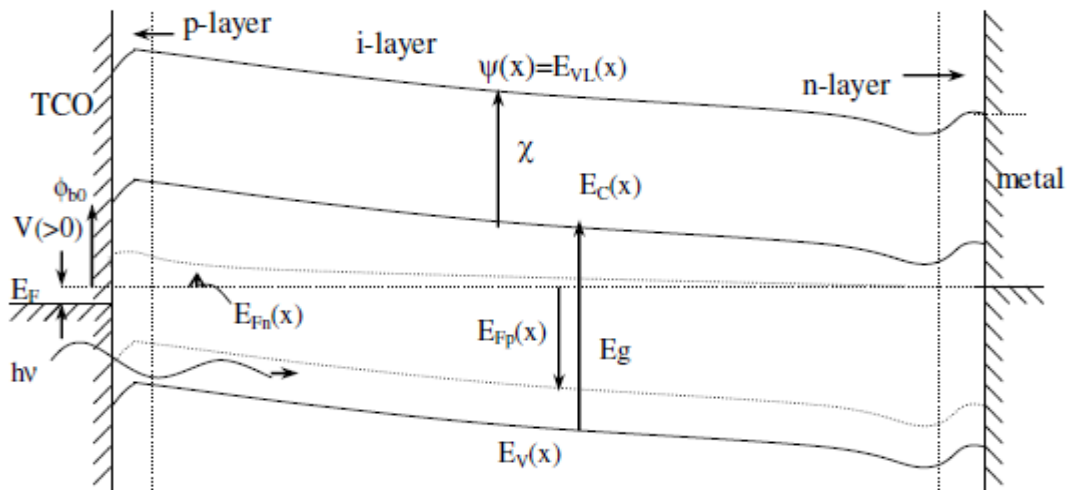


Figure III.2 : Diagramme des bandes d'énergie pour une structure p-i-n, hors équilibre thermodynamique [1,5].

$$p(x) = N_v \exp \left[-\frac{\{E_{Fp}(x) - E_v(x)\}}{KT} \right] \quad (\text{III.16a})$$

$$n(x) = N_c \exp \left[-\frac{\{E_c(x) - E_{Fn}\}}{KT} \right] \quad (\text{III.16b})$$

III.2.3. la densité de dopage effective

Les états singuliers localisés, résultants d'une introduction intentionnelle d'impuretés (dopage) ou involontaire

(Contamination) peuvent être exprimés par l'équation :

$$N_{net}^+ = N_D^+ - N_A^- \quad (\text{III.17})$$

$N_D^+ = N_D$: Représente la concentration des donneurs ionisés.

$N_A^- = N_A$: Représente la concentration des accepteurs ionisés.

Actuellement, seulement les états discrets entièrement ionisés existent dans notre modèle hors équilibre .Par conséquent :

$$N_{net} = N_D - N_A$$

Où N_D et N_A sont les concentrations d'impureté de donneur et accepteur respectivement [5].

III.2.4. Etats dans la bande interdite

Dans les semi-conducteurs amorphes ou désordonnés où ce modèle est principalement développé, il existe des états locaux continus dans l'écart. Ces états proviennent des queues de bande représentées par des courbes exponentielles et des défauts ou liaisons pendantes représentées par des Gaussiennes. La figure (III.3) illustre les deux différents types de distribution des états localisés continus dans le gap intégrés dans le programme [6].

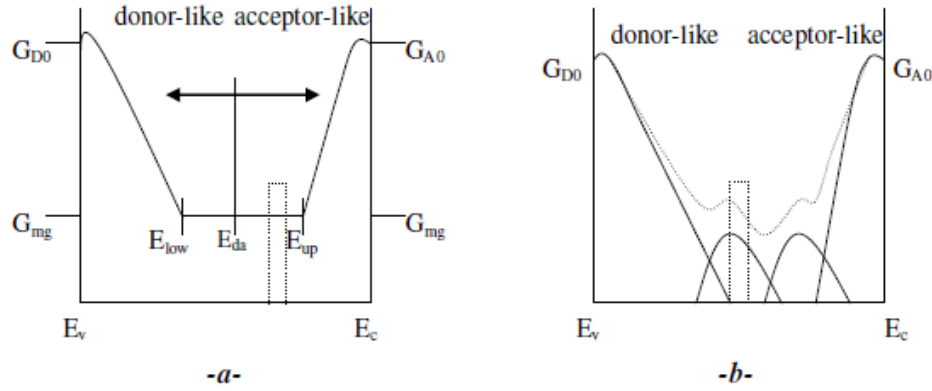


Figure III.3 : Distribution des états localisés dans le gap utilisée dans le programme.
 (a) Modèle en U. (b) Distribution Gaussienne [6].

III.2.4.A. Etats de queue de bande

Les états donneurs, qui débordent de la bande de valence et notés $D^{+/0}$, sont mesurés à partir de E_v . Leur distribution est donnée par:

$$g_{DT}(E) = G_{D0} \cdot \exp\left(-\frac{E}{E_D}\right) \quad (\text{III.18})$$

Les états accepteurs, qui débordent de la bande de conduction notés $D^{-/0}$, sont mesurés à partir de E_c . Leur distribution est donnée par:

$$g_{AT}(E) = G_{A0} \cdot \exp\left(-\frac{E}{E_A}\right) \quad (\text{III.19})$$

Les termes figurants dans les équations (III-18) et (III-19), sont:

- g : Densité d'états en $\text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$.
- G_{D0} : Pré facteur correspondant aux états de la queue de bande, qui débordent de la Bande de valence, en $\text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$.
- G_{A0} : Pré facteur correspondant aux états de la queue de bande, qui débordent de bande de Conduction, en $\text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$.
- E_D : Largeur énergétique moyenne des états de la queue de bande de valence.
- E_A : Largeur énergétique moyenne des états de la queue de bande de conduction.

III.2.4.B. Etats du centre du gap

III.2.4. B .1 . Pour la distribution en U

La densité d'états au centre du gap G_{mg} , est considérée constante, dans le cas de la distribution en U. Elle est positive et mesurée vers le bas à partir de (E_C). Cette région est comprise entre E_{up} et $E_g - E_{low}$.

E_{up} et E_{low} sont données par:

$$E_{up} = E_A \cdot \ln \left(\frac{G_{A0}}{G_{mg}} \right) \quad (III.20)$$

$$E_{low} = E_D \cdot \ln \left(\frac{G_{D0}}{G_{mg}} \right) \quad (III.21)$$

E_{up} : est mesurée positivement vers le bas à partir de E_C .

E_{low} : est mesurée positivement vers le haut à partir de E_V .

Les états du centre du gap sont accepteurs ($D^{-/0}$) pour ($E - E_C$) inférieure à E_{da} . Ils sont donneurs ($D^{+/0}$) pour ($E - E_C$) supérieure à E_{da} . Comme définie précédemment, E_{da} est dite énergie de changement (Switch-over Energy). Elle est mesurée vers le bas à partir du bord de la bande de conduction E_C . Le modèle en U est l'association de la région constante et des queues de bande [1, 4].

III.2.4. B .2 . Pour la distribution Gaussienne

Les états au centre du gap peuvent aussi être modélisés par deux fonctions gaussiennes (figure III-3-b). La séparation, en énergie, entre les pics des gaussiennes est en moyenne de 0,5eV, dans le cas du silicium amorphe hydrogéné (a-Si :H). Cette énergie est dite énergie de corrélation. La valeur de 0,5 eV permet d'obtenir une cuvette dans la densité d'état (DOS), entre les pics gaussiens. Ceci est un résultat vérifié expérimentalement, par absorption et photoconductivité [7, 8].

Au-dessus de E_{da} la fonction Gaussienne correspond aux états accepteurs ($D^{-/0}$), de densité volumique N_{AG} . Au-dessous de E_{da} la fonction Gaussienne correspond aux états donneurs ($D^{+/0}$), de densité volumique N_{DG} . Leurs expressions sont:

$$g_{AG}(E'') = \left(\frac{N_{AG}}{\sqrt{2\pi}\sigma_{AG}} \right) \exp \left\{ \frac{(E'' - E_{AG})^2}{2\sigma_{AG}^2} \right\} \quad (\text{III.22a})$$

$$g_{DG}(E''') = \left(\frac{N_{DG}}{\sqrt{2\pi}\sigma_{DG}} \right) \exp \left\{ \frac{(E''' - E_{DG})^2}{2\sigma_{DG}^2} \right\} \quad (\text{III.22b})$$

Où N_{AG} et N_{DG} représentent les positions en eV des pics des deux Gaussiennes.

E_{AG} Est mesurée à partir de la bande de conduction.

E_{DG} Est mesurée à partir de la bande de valence.

σ_{AG} et σ_{DG} représentent l'écart type des deux gaussiennes.

Les énergies E'' et E''' sont mesurées respectivement à partir des pics E_{AG} et E_{DG} en eV [9].

III.2.5. Probabilité de la fonction d'occupation

Comme mentionné ci-dessus, dans ce modèle, il existe un état continu local dans l'intervalle semi-conducteur amorphe. Pour calculer les valeurs de p_T et n_T , à l'équilibre thermodynamique et des états déséquilibrés, il faut d'abord vérifier la probabilité d'occuper la fonction.

III.2.5. A. A l'équilibre thermodynamique

Dans les semi-conducteurs, la répartition en énergie des électrons suit la loi statistique fondamentale de Fermi-Dirac. Cette fonction f_0 donne la probabilité de présence d'un électron à un niveau d'énergie donnée E_t . La fonction de distribution de Fermi-Dirac est donnée par l'expression [2].

$$1 - f_0 = 1 - \frac{1}{1 + \exp \left\{ \frac{(E_T - E_{F0})}{KT} \right\}} \quad (\text{III.23a})$$

$$f_0 = \frac{1}{1 + \exp\left\{\frac{(E_T - E_{F0})}{KT}\right\}} \quad (\text{III.23b})$$

f_0 Représente la probabilité d'occupation d'un électron dans un état donné. T est la température ambiante en degré Kelvin (K). E_{F0} est le niveau de Fermi à l'équilibre thermodynamique. K est la Constante de Boltzmann. E_T est la Position d'un niveau d'énergie dans le gap.

III.2.5.B. Hors équilibre thermodynamique

Afin d'obtenir l'expression de ce type de fonction de probabilité d'occupation en dehors de l'équilibre thermodynamique, Nous avons utilisé le modèle de Shockley-Read-Hall [10, 11] et nous avons considéré les quatre processus suivants pour peupler et dépeupler un état particulier de défaut de densité N_t dans le gap de mobilité :

- Le taux d'émission des électrons e_n , proportionnel à la concentration des pièges N_t et au taux d'occupation f , est donné par:

$$e_n = a_n f N_t \quad (\text{III.24a})$$

- Le taux de capture des électrons c_n , proportionnel à la concentration des pièges N_t et au taux d'inoccupation $1-f$, est donné par:

$$c_n = n(1-f) N_t \sigma_n v_{th} \quad (\text{III.24b})$$

- Le taux d'émission des trous e_p s'écrit:

$$e_p = a_p (1-f) N_t \quad (\text{III.24c})$$

- Le taux de capture des trous c_p s'écrit :

$$c_p = p f N_t \sigma_p v_{th} \quad (\text{III-24d})$$

σ_n, σ_p sont respectivement les sections efficaces de capture des électrons et des trous par les états N_t (cm^{-3}) (Concentration de centres recombinants d'énergie E_t), v est la vitesse thermique, a_n et a_p sont des constants à déterminer. La fonction de probabilité d'occupation f sous tension ou lumière, est donnée par [6].

A l'état stationnaire, le taux de recombinaison R des électrons, en $\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$, retenus dans les centres recombinants est:

$$R = c_n - e_n = c_p - e_p \quad (\text{III.25a})$$

A l'équilibre thermodynamique, $R = 0$ et nous aurons:

$$c_n - e_n = c_p - e_p = 0 \quad (\text{III-25b})$$

En utilisant l'équation (III-23), $e_n = c_n$ et $n = n_0$, les équations (III -24a) et (III -24b) donnent

$$a_n = n_0 \frac{(1-f_0)}{f_0} \sigma_n v_{th} \text{ ou } a_n = \sigma_n v_{th} n_1. \text{ Enfin :}$$

$$n_1 = N_C \exp\left(-\frac{\{E_C - E_t\}}{KT}\right) \quad (\text{III.26})$$

De même, en utilisant $f = f_0$, $e_p = c_p$ et $p = p_0$, on obtient à partir des équations (III 24c) et (III-24d) donnent :

$$a_p = p_0 \frac{f_0}{(1-f_0)} \sigma_p v_{th} \text{ ou } a_p = \sigma_p v_{th} p_1 \text{ Enfin :}$$

$$p_1 = N_V \exp\left(-\frac{\{E_t - E_V\}}{KT}\right) \quad (\text{III.27})$$

N_C et N_V Sont les densités d'états effectives dans la bande de conduction et de valence. n et p sont respectivement les densités des électrons et des trous dans la bande de conduction et de valence.

n_0, p_0 : Respectivement les concentrations d'électrons et trous libres, à l'équilibre Thermodynamique.

n_1, p_1 : Représentent respectivement les concentrations d'électrons et trous, si le niveau de Fermi coïncidait avec E_t .

N_C, N_V : Densités effectives d'états dans la bande de conduction et dans la bande de valence.

En combinant les relations (III-25), (III-26) et (III-27), on obtient la fonction finale d'occupation du niveau Et par un électron, hors équilibre thermodynamique.

$$f = \frac{(\sigma_n n_1 + \sigma_p p_1)}{(\sigma_n (n + n_1) + \sigma_p (p + p_1))} \quad (\text{III-28})$$

Cette probabilité est donnée, pour les trous, par la quantité $(1 - f)$.

III.2.6. Densité de charges dans les états localisés

La densité de charges dans les états localisés p_T et n_T sont obtenus en intégrant le produit de la densité de ces états localisés continus et la fonction de probabilité d'occupation dans le gap. Pour cela, le gap est divisé en un grand nombre d'intervalles. La densité d'états par énergie G_t est constante dans chacun de ces petits intervalles d'énergie $[E_1, E_2]$. G_t c'est la valeur de la densité de défauts au milieu de l'intervalle d'énergie, calculé dans les états localisés continus [5].

III.2.6.A. A l'équilibre thermodynamique

Dans la partie inférieure du gap et dans l'intervalle d'énergie $[E_1, E_2]$, où la densité d'état est approximativement constante ($G_t = G_D$), la densité des trous piégés est donnée par:

$$p_t = G_D \int_{E_1}^{E_2} (1 - f_0(E)) dE \quad (\text{III-29a})$$

Dans la partie supérieure du gap, dans l'intervalle d'énergie $[E_1, E_2]$, où la densité d'état est approximativement constante ($G_t = G_A$), la densité des électrons piégés est donnée par :

$$n_t = G_A \int_{E_1}^{E_2} f_0 dE \quad (\text{III-29b})$$

G_D et G_A sont respectivement les densités constantes des états donneurs et accepteurs, dans l'intervalle $[E_1, E_2]$.

III.2.6.B. Hors équilibre thermodynamique

Il faut procéder, dans ce cas, avec la fonction d'occupation hors équilibre thermodynamique f . La densité de trous piégés sera donnée par:

$$p_t = G_D \int_{E_1}^{E_2} (1 - f(E)) dE \quad (\text{III-30a})$$

La densité d'électrons piégés :

$$n_t = G_A \int_{E_1}^{E_2} f(E) dE \quad (\text{III-30b})$$

III.2.7. Taux de recombinaison dans les états localisés

L'équation du processus de recombinaison R , dans les états du gap, se base sur le modèle de Shockley-Read-Hall. En utilisant l'expression (III-25), le résultat est :

$$R = c_n - e_n = c_p - e_p \quad (\text{III-31})$$

$$R = \sigma_n v_{th} N_t [n(1-f) - n_t f] \quad (\text{III-32})$$

En utilisant l'expression (II-24b) pour c_n , R est donné par:

$$R = \sigma_n \sigma_p v_{th} N_t \left[\frac{np - n_i^2}{\sigma_n (n + n_1) + \sigma_p (p + p_1)} \right] \quad (\text{III-33})$$

n_i : Étant la concentration intrinsèque donnée par:

$$n_i = \sqrt{N_C N_V} \exp\left(\frac{-E_g}{2KT}\right) \quad (\text{III-34})$$

Le taux de recombinaison par les défauts, situés dans l'intervalle $[E_1, E_2]$ sera:

$$R = \sigma_n \sigma_p v_{th} G_t \int_{E_1}^{E_2} \left[\frac{np - n_i^2}{\sigma_n (n + n_1) + \sigma_p (p + p_1)} \right] dE \quad (\text{III-35})$$

III.2.8. Densités de courants

Les équations différentielles qui régissent les densités de courants d'électrons et de trous, sont données par les équations (III-2) et (III-3). Les densités de courants, en fonction des pseudo-niveaux de Fermi, sont [12] :

$$J_p(x) = qp\mu_p \nabla E_{Fp} \quad (\text{III-36a})$$

$$J_n(x) = qn\mu_n \nabla E_{Fn} \quad (\text{III-36b})$$

Où μ_n (μ_p) sont respectivement la mobilité de l'électron (trou), E_{Fn} (E_{Fp}) les quasi-niveaux de Fermi pour les électrons et les trous respectivement et q est la charge électrique. Les équations de J_n , J_p s'écrivent, sous la forme :

$$J_n = qn\mu_n \nabla(\psi - \chi) + qD_n \nabla n - qnD_n \nabla(\ln N_C) \quad (\text{III-37a})$$

$$J_p = qp\mu_p \nabla(\psi - \chi - E_g) - qD_p \nabla p + qpD_p \nabla(\ln N_V) \quad (\text{III-37b})$$

Où ψ est le niveau de vide, χ est l'affinité électronique, D_n (D_p) sont respectivement les constantes de diffusion de l'électron (trou), N_C (N_V) sont respectivement les densités d'états effectives dans la bande de conduction (valence). Dans les équations (III-37a) et (III-37b), le premier terme représente le courant de conduction, dû au champ électrique interne de la jonction. Le deuxième terme est le courant de diffusion, dû aux porteurs majoritaires qui ont suffisamment d'énergie pour vaincre le champ électrique et diffuser vers la région où ils sont peu nombreux. Le troisième terme est dû au gradient de densité effective d'état de la bande de conduction ou de la bande de valence [13].

III.3. Modèle optique

Dans le modèle utilisé par le code AMPS-1D, le flux incident comporte deux parties :

- Une partie spéculaire pouvant être réfléchié ou transmise.
- Une partie diffusée pour tenir compte des rugosités des interfaces. Cette partie, peut aussi être réfléchié ou transmise.

Le taux de génération G , dans les équations de continuité (III-2) et (III-3), est calculé en utilisant une simple loi exponentielle de l'absorption. Cette loi s'écrit :

$$G = \sum_{\lambda} \alpha_{\lambda} \phi_{\lambda} \exp(-\alpha_{\lambda} x) \quad (\text{III-38})$$

L'expression (III-38) exprime la génération due à la lumière incidente d'un spectre arbitraire. La lumière étant composée, Il représente le flux correspondant à chaque couleur. Le coefficient d'absorption α dépend de la nature du matériau. La loi d'absorption (III-49-38), utilisée dans le calcul du terme de génération, présente certains inconvénients:

Les pertes optiques par réflexion, dans les oxydes conducteurs et transparents, utilisés pour le contact avant et le contact arrière, ne sont pas considérées.

Les effets interférentiels spéculaires qui sont le résultat du piégeage de la lumière par réflexion et transmission, sur les surfaces rugueuses, ne sont pas pris en compte [14].

III.4. Méthode numérique de résolution

Afin de résoudre les équations différentielles couplées, AMPS-1D utilise l'algorithme de Newton Raphson. La méthode consiste à trouver de manière itérative la solution ou la racine de la fonction $f(x)$. Si la fonction $f(x)$ est continue et différentiable, elle est proche d'un point x ; alors elle s'écrit comme un développement en série de Taylor:

$$f(x) = f(x_0) + (x - x_0) \dot{f}(x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2!} \ddot{f}(x_0) \quad (\text{III-39})$$

En considérant uniquement les deux premiers termes, il est possible de trouver la solution de l'équation $f(x) = 0$. L'erreur est :

$$x - x_0 = \delta_x = - \frac{f(x_0)}{\dot{f}(x_0)} \quad (\text{III-40})$$

La différence entre la valeur initiale x_0 et la racine x , est ajoutée à la valeur initiale x_0 pour une meilleure estimation de la racine pour une prochaine itération.

Cette méthode exige une bonne estimation de x_0 , pour les trois variables indépendantes ψ , E_{Fn} et E_{Fp} . La procédure itérative s'arrête quand la différence correspond au critère de convergence, c'est-à-dire, inférieure à une valeur prédéterminée par l'erreur ε .

Les trois équations suivantes, (III-41a), (III-41b) et (III-41c), à la $i^{ème}$ itération, avec les termes de dérivation exprimés comme différences centrales, s'écrivent comme suit:

$$F_{1i} = \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{\Delta x^2} - \frac{q}{\varepsilon} \left[p_p - n_i + N_{Di} + N_{Ai} + \left(\sum_{défauts} \rho_t = 0 \right) \right] \quad (III-41a)$$

$$F_{2i} = (G - R) - \frac{1}{q} \left[\frac{J_{p,i+1/2} - J_{p,i-1/2}}{\Delta x} \right] = \frac{\partial p}{\partial t} = 0 \quad (III-41b)$$

$$F_{3i} = (G - R) + \frac{1}{q} \left[\frac{J_{n,i+1/2} - J_{n,i-1/2}}{\Delta x} \right] = \frac{\partial n}{\partial t} = 0 \quad (III-41c)$$

Où Δx est l'espacement du point. Les dérivées partielles F_{1i} , F_{2i} et F_{3i} correspondent aux variables inconnues, par exemple $(\psi_i/KT, E_{Fni}/KT, E_{Fpi}/KT$ à la $i^{ème}$) itération. L'équation matricielle spécifique est résolue pour la matrice X comme suit:

$$[A].[X] = [B] \quad (III-42)$$

A étant la matrice Jacobéenne des dérivés partielles des trois fonctions F_{1i} , F_{2i} et F_{3i} . Les

Matrices X et B sont données par :

X est construite comme :

$$X = \begin{bmatrix} \uparrow \\ \delta\psi_i/KT \\ \delta E_{Fn,i}/KT \\ \delta E_{Fp,i}/KT \\ \downarrow \end{bmatrix} \quad (III.43)$$

Et la matrice B a construit comme :

$$B = - \begin{bmatrix} \uparrow \\ F_{1,i} \\ F_{2,i} \\ F_{3,i} \\ \downarrow \end{bmatrix} \quad (\text{III.44})$$

La matrice est placée sous cette forme de sorte que la matrice Jacobéenne soit inversible. Cette formule minimise le temps requis pour l'inversion et l'analyse du système. Après chaque itération, la matrice est ajoutée à la valeur estimée finale jusqu'à ce que la valeur minimale dans la matrice soit inférieure à l'erreur prédéterminée. Pour toutes les inconnues sans dimension, l'erreur en dehors de l'équilibre thermodynamique est de 10^{-6} et l'erreur sous l'équilibre thermodynamique est de 10^{-9} .

III.5. Aperçu sur le fonctionnement de logiciel AMPS-1D

Le logiciel de simulation AMPS-1D est un outil de simulation numérique à une dimension (1D) dédié à l'étude de dispositifs semi-conducteur à hétérojonctions et homo-jonction. Il permet de définir et de simuler le fonctionnement d'une structure composée éventuellement d'un empilement de couches de matériaux semi-conducteurs différents.

Lors de la simulation d'une structure, le logiciel AMPS-1D présente différentes fenêtres qui traitent séparément les paramètres des matériaux composant la structure. La figure (III.4), est une liste des paramètres d'entrée que L'AMPS a besoin pour résoudre l'ensemble des équations de transport et de conditions aux limites. Les paramètres peuvent se trouver dans l'une des trois catégories générales suivantes :

1-Paramètres qui s'appliquent au dispositif entier.

2-Paramètres qui s'appliquent à une région particulière du dispositif.

3-Paramètres qui définissent les spectres d'illumination (pour le cas de la lumière).

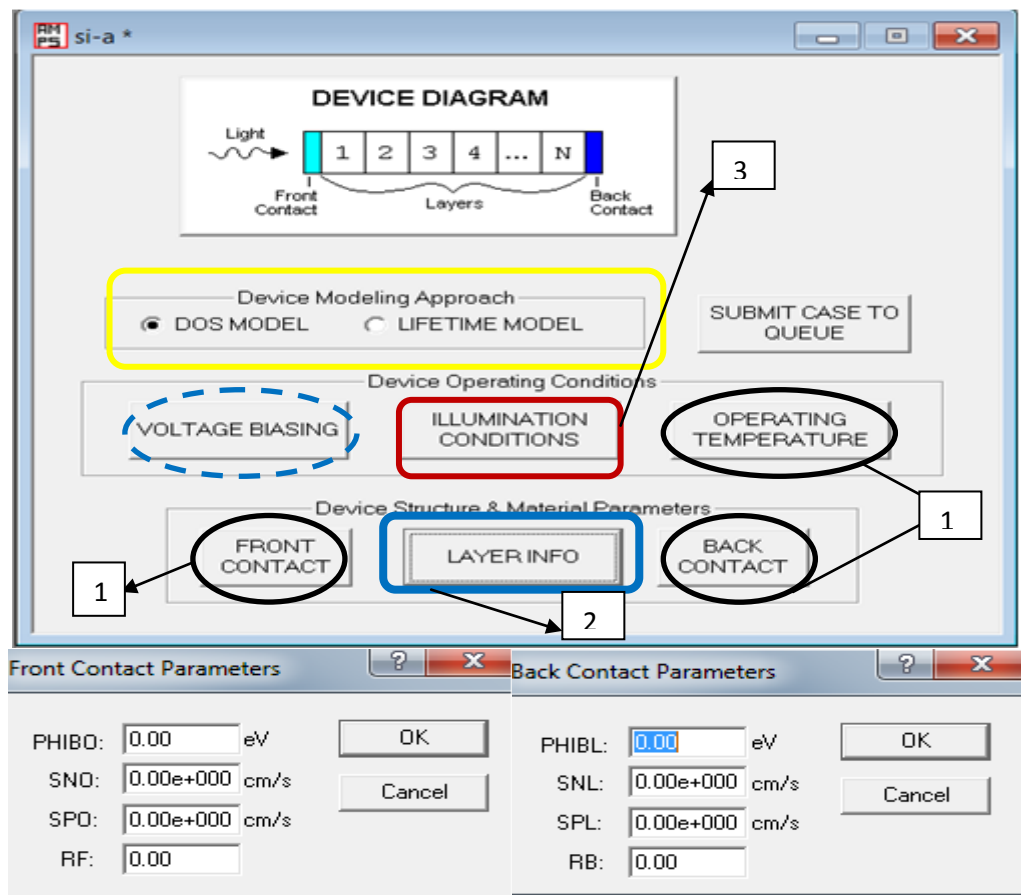


Figure III.4 : Différentes fenêtres pour introduire les paramètres [15].

III.5.1. Paramètres qui s'appliquent au dispositif entier

Les Paramètres qui s'appliquent au dispositif entier incluent ce qui suit figure (III.4) :

1. Conditions aux limites : PHIBO, PHIBL
2. Vitesse de recombinaison en surface : SNO, SPO, SNL, SPL
3. Coefficient de réflexion de la lumière entrant sur les surfaces avant et arrière : RF , RB
4. La température $T(k)$: Ces paramètres sont entrés seulement une fois, et appliquent en général au dispositif entier.

III.5.2. Paramètres qui s'appliquent à une région particulière :(voir Figure III.5)

1. La largeur W ou $XLAYER$ (A) d'une région.
2. Propriétés du matériau : EPS , N_C , N_V , E_G , E_{GOP} , CHI , MUN , MUP
3. États de défaut discret :
 - A/ Concentrations du niveau donneur discret et énergies d'ionisation.
 - B/ Concentration du niveau accepteur et énergies d'ionisation :
4. Défauts localisés aux queues et aux états moyens (forme ``V`` ou ``U``)
5. Niveaux gaussiens (0,1 ou 2 niveaux accepteurs et 0,1 ou 2 niveaux donneurs) :

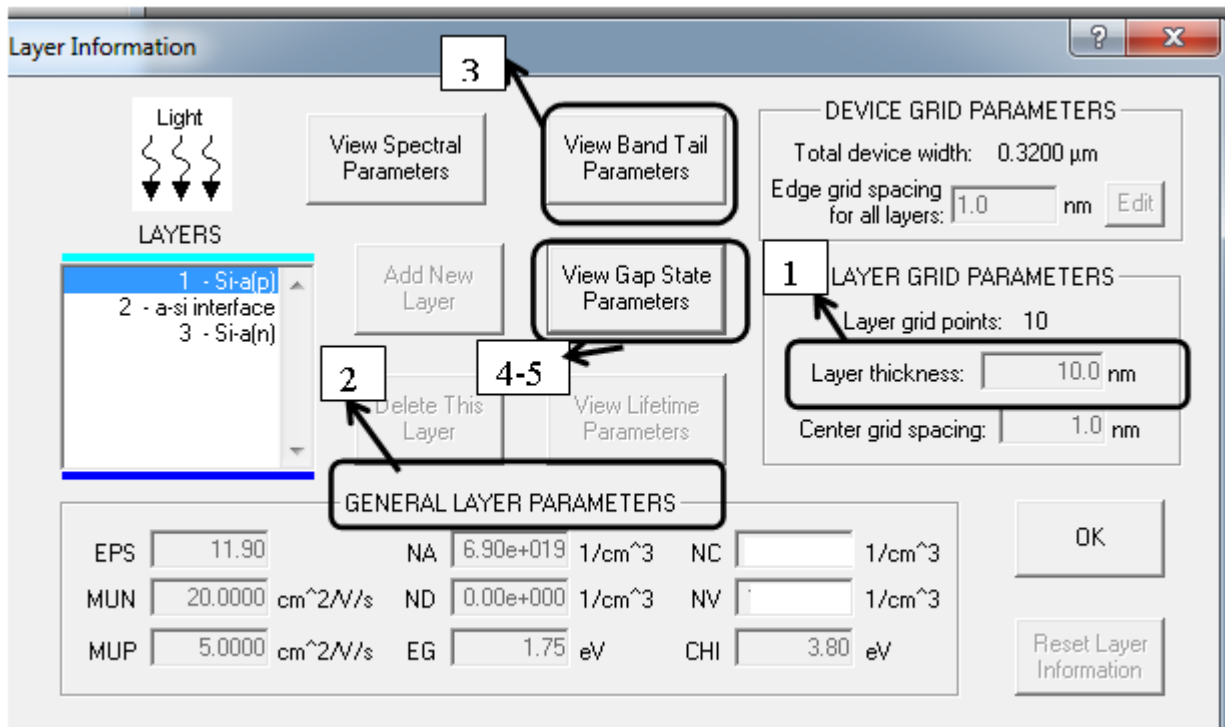


Figure III.5 : Boîte de dialogue pour définir la structure à simuler et configurer les paramètres de ses différentes couches [15].

III.5. 3. Paramètres qui définissent le spectre d'illumination :

Le premier de ces paramètres appelé LIGHT dans le programme détermine si la lumière est nécessaire dans le programme. Si LIGHT = NO, il n'est pas nécessaire de définir un spectre, et l'utilisateur ne s'intéresse qu'aux caractéristiques de dispositif dans l'obscurité sous l'état de

polarisation. Cependant, si l'utilisateur souhaite voir le dispositif sous illumination, alors pour chaque longueur d'onde du spectre, les paramètres suivants (unités entre parenthèses) doivent être définis:

- 1- La longueur d'onde LAMBDA (*micromètre*)
- 2- Le flux incident à cette longueur d'onde ($1/cm^2/sec$)
- 3- Le coefficient d'absorption ALPHA ($1/cm$) pour chaque longueur d'onde du spectre d'éclairement.

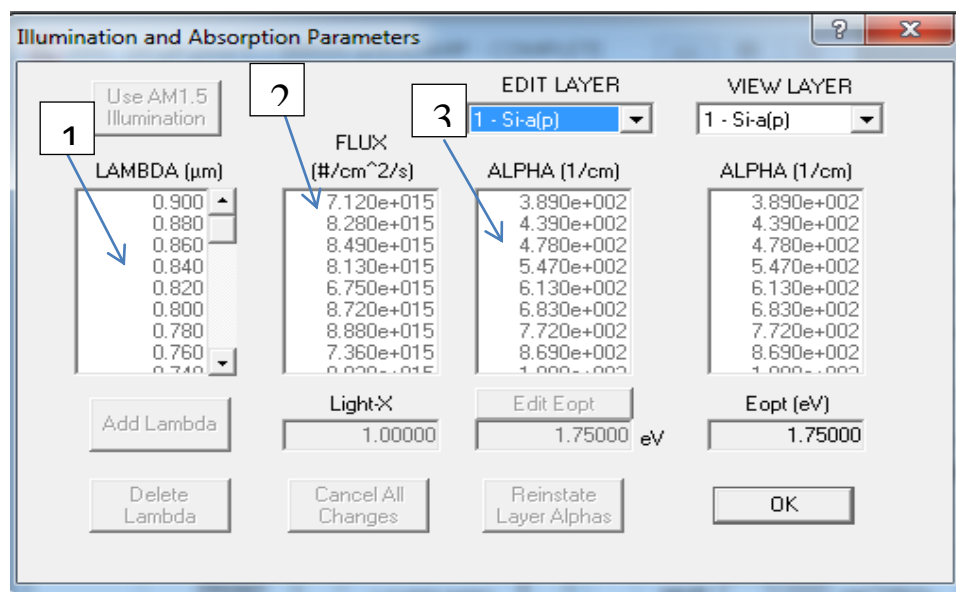


Figure III.6 : Boîte de dialogue des paramètres d'illumination et d'absorption [15].

Une fois les paramètres d'éclairage sont définis, il est nécessaire de distinguer la mobilité de l'espace E_{gu} et de l'espace optique E_{gop} lors de la modélisation de matériaux semi-conducteurs amorphes [10]. Dans un matériau semi-conducteur monocristallin: $E_{gu} = E_{gop} = E_g$, et dans le cas d'un état amorphe, les états incluant la transmission dans la bande délocalisée peuvent exister à des seuils différents liés à la transition optique entre les bandes. Dans AMPS-1D, l'utilisateur peut saisir respectivement l'écart de mobilité $E_{gu} = E_C - E_V$ et l'écart optique E_{gop} .

III.5.4. Courbes de Sortie de la cellule simulée par l'AMPS-1D

La Figure (III.7) montre que l'AMPS-1D peut également générer plusieurs sorties avec ses courbes: caractéristiques courant (I), tension (V) dans l'obscurité et la lumière du soleil, paramètres PV (courant de court-circuit, efficacité de conversion électrique, tension de circuit en circuit ouvert, facteur de forme FF, réponse spectrale, carte énergétique), etc.....

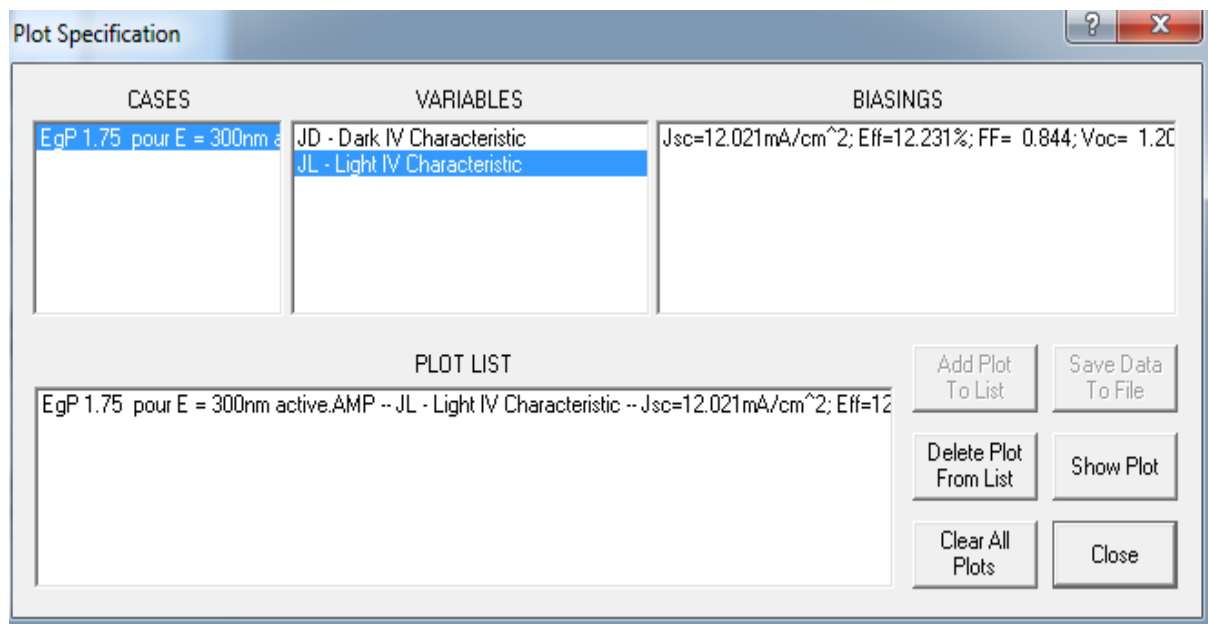


Figure III.7 : Courbes de Sortie de la cellule simulée par l'AMPS-1D [15].

III.6. Références

- [1] S. Fonash, J. Arch., J. Hou, W. Howland, P. Mcelheny, A. Moquin, M. Rogosky, T. Tran, H. Zhu, F. Rubinelli, "A Manual for AMPS-1D for windows 95/NT a One-Dimensional Device Simulation Program for the Analysis of Microelectronic and Photonic Structures", The Pennsylvania State University (1997).
- [2] P.J. MCELheny, J. Arch, H.S. Lin, S.J. Fonash, J." Range of validity of the surface -photovoltage diffusion length measurement: A computer simulation", of Appl. Phys., 64 (3), 1254, (1988).
- [3] P. Leblan, J. Perrin, " Numerical modeling of the optical properties of hydrogenated amorphous-silicon-based p-i-n solar cells deposited on rough transparent conducting oxide Substrates", J. Appl. Phys. 75 , 1074,(1994).

- [4] P. Chatterjee, " Computer modeling of the dependence of the J-V characteristics of a-Si:H solar cells on the front contact barrier height and gap state density", Technical, Digest of International PVSEC-6, New Delhi, India, Feb. 10-14 ,pp 329-334,(1992).
- [5] P. Chatterjee , " Photovoltaic performance of a-Si:H homo-junction p-i-n solar cells: A computer simulation study", Journal of Applied Physics, Vol 76 No.2, pp. 1301-1313, ISSN 0021-8979, (1994).
- [6] N. Palit, "Energy Research, Indian Association for the Cultivation of Sciences", Ph.D. Thesis ,India, (2000).
- [7] Pierz, K., Fuhs, W. and Mell, H., Philos. Mag. B 63.123,(1991).
- [8] M. Gunes, C.T. Malone, J.L. Nicque, S.J. Fonash and C.R. Wronski, "Proceeding of the 6th International PVSEC", New Delhi, India, Feb.10-14, edited by B.K. Das and S.N.Singh, (1992).
- [9] P. Chatterjee, "A computer analysis of the effect of a wide-band-gap emitter layer on the Performance of a-Si:H- based hetero-junction solar cells", Journal of Applied Physics, Vol 79, No 9, pp. 7339-7347, ISSN (print) 0021-8979,(1996).
- [10] W. Shockley and W. T. Read Statistics of the recombination of holes and electrons. Physical Review 87 ,pp.835-842,(1952).
- [11] R. Legros, "Les semi-conducteurs (physique des semi-conducteurs technologie-diodes) ", Tome 1, éditions Eyrolles, paris (1974).
- [13] P. Chatterjee, F. Leblanc, M. Favre, and J. Perrin "A global electrical-optical Model of thin film solar cells on textured substrates", Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 426 ,pp. 593-598,(1996).
- [14] N. Palit, P. Chatterjee, " computer analysis of a-Si :H based double junction solar cells" Energy Research Unit, Indian Association for the Cultivation of Science, volume 467, India,(1997).
- [15] AMPS 1D site web, université de Pennsylvanie : <http://www.emprl.psu.edu/amps>.

Chapitre IV :
Simulation et Optimisation des cellules solaires en
technologie couches minces.

IV. Introduction

Le rendement de la cellule photovoltaïque est un paramètre très important pour la caractérisation d'une cellule solaire, bien sûr selon le matériau utilisé. Nous avons fait une étude par simulation sur deux types de cellules solaires citées comme suit :

- 1- Cellule solaire en couche mince à simple jonction (p-i-n) à base de silicium amorphe :
a-Si :H(p)/ a-Si :H(i)/ a-Si :H(n)/Métal.
- 2- Cellule solaire en couche mince à base de matériau binaire, tellure de cadmium (CdTe) et de sulfure de cadmium (CdS) :
ZnO(n)/CdS(n)/CdTe(p)/Métal.

Quelle que soit la structure de la cellule solaire, généralement, parmi les paramètres à optimiser sont : l'épaisseur de la cellule, les niveaux et les profils de dopage, la configuration des contacts, le confinement optique, bien entendu, la structure de la cellule solaire, la qualité du matériau du substrat (mobilité, durée de vie), la qualité du contact ohmique, la vitesse de recombinaison de la surface (avant et arrière)...etc.

Par conséquent, l'optimisation des cellules solaires consiste à étudier les effets de ces paramètres sur le rendement afin d'obtenir une structure qui se traduit par une efficacité maximale. Nous avons utilisé le logiciel AMPS1D, développé par le professeur Fonash [1], comme modèle de simulation.

IV.1 Simulation et optimisation de la première cellule solaire à simple jonction :(p-i-n) à base de (a-Si : H)

Les premières cellules à base de silicium amorphe sont apparues en 1976 [2], et ont été utilisées dans les calculatrices. Quelques années plus tard, d'autres applications de ces matériaux ont été apparues: transistors à couches minces, scanners optiques, écrans à cristaux liquides...etc.

Les semi-conducteurs à couches minces, en particulier le silicium amorphe hydrogéné (a- Si : H), présentent un intérêt particulier dans les applications photovoltaïques (PV) en raison de leurs coûts de production inférieurs par rapport aux technologies traditionnelles basées sur le silicium cristallin massif. De plus, le silicium amorphe hydrogéné présente des avantages par rapport au silicium cristallin [3] :

- La capacité de dépôt à basse température, Le gap d'énergie qui est de type direct réglable ou la bande interdite de (a-Si :H) peut être ajustée de 1,65 à 1,88 eV [4], ainsi le coefficient d'absorption élevé ($>10^5 \text{ cm}^{-1}$) et la couche absorbante qui ne nécessite que quelques micromètres pour absorber 90 % du spectre solaire [5].

Le silicium amorphe est un semi-conducteur avec d'excellentes propriétés optiques mais de très faibles propriétés électroniques, ce qui conduit à des rendements assez faible.

Le rendement maximum des cellules à base de (a-Si :H), pour des tailles significatives, reste limité, notamment parce que le silicium amorphe souffre d'un effet de vieillissement sous lumière lié à l'instabilité de l'hydrogène dans sa structure. Cet effet lié à la création de défauts métastables appelé : Effet Staebler-Wronski [6]. Récemment, différents efforts ont été faits pour améliorer les technologies de croissance pour réduire la densité des défauts et augmenter la stabilité [7, 8].

Depuis plusieurs années, en vue d'améliorer les performances photovoltaïques de silicium amorphe et de les rendre beaucoup plus stables, vis à vis de l'effet Staebler-Wronski, on distingue essentiellement deux approches [9] :

- L'approche I_{cc} : il s'agit de mettre au point des techniques de piégeage efficaces de la lumière pour augmenter le courant de court-circuit I_{cc} de la cellule solaire.

- L'approche V_{co} : des solutions sont à développer pour améliorer la tension de circuit ouvert V_{co} de la cellule solaire.

Il existe également plusieurs possibilités pour améliorer l'efficacité de conversion des cellules solaires (p-i-n) à base de silicium amorphe hydrogéné. D'une part, les interfaces entre les matériaux de la fenêtre [10], les électrodes et la zone intrinsèque (zone active) doivent être de bonnes qualités. D'autre part, un matériau semi-conducteur à large bande interdite, de type P, peut être utilisé comme couche fenêtre, afin d'améliorer la transmission de la lumière. Cette même couche doit être de haute conductivité pour augmenter le potentiel électrostatique dans la structure et réduire les effets de la résistance série [11].

Bien que l'ensemble du processus soit assez compliqué, coûteux et long, les performances des cellules photovoltaïques (PV), au fil du temps, sont améliorées, grâce à la simulation numérique, ce qui a aidé à trouver une structure optimisée avec de bons paramètres d'ajustement, en réduisant ainsi considérablement la complexité, le coût et le temps de fabrication.

Notre étude est consacrée sur l'amélioration des performances de la cellule solaire à simple dessin p-i-n, en utilisant le silicium amorphe hydrogéné comme matériau absorbant. Notre objectif était d'optimiser les différents paramètres structurels caractérisant chaque couche de la cellule.

Dans ce qui suit, la simulation et l'optimisation de la cellule solaire (p-i-n) à simple jonction à base de (a-Si :H) se feront à l'aide l'AMPS-1D.

Nous chercherons à optimiser l'épaisseur de la couche active en fonction de la densité des états DOS de cette couche et le gap de mobilité, afin d'obtenir de bonnes performances photovoltaïques. Pour l'analyse, nous faisons recours au taux de recombinaison en condition de circuit ouvert (à $V=V_{co}$). Il s'agit d'un outil qui se révèle très utile pour analyser l'influence des différentes parties de la cellule solaire sur la tension V_{co} [9].

IV.1.1. Description de la structure :

La figure (IV.1) illustre la schématique de la cellule (p-i-n) à base de (a-Si :H). Le dépôt de la cellule était sur un substrat métallique qui joue le rôle de contact arrière. Pour le contact avant, une couche TCO (Transparent Conducting Oxide) a été déposée, sur le côté p. Le dispositif est constitué d'une couche n- (a-Si :H) intrinsèque d'épaisseur : 300 à 600nm, prise en « sandwich » entre une couche n d'épaisseur : 10 nm et une couche fenêtre p à base de silicium amorphe hydrogéné p- (a-Si :H) d'épaisseur 10 nm.

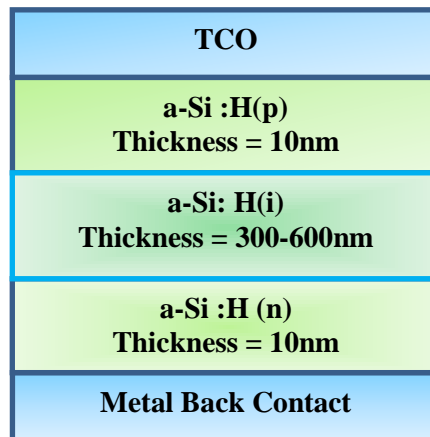


Figure IV. 1 : Représentation schématique de la cellule solaire simple (p-i-n) à base de silicium amorphe.

IV.1.2. Paramètres d'entrées et Simulation de la structure

IV.1.2. A. Paramètres d'entrées électriques

Les calculs utilisant le programme AMPS-1D nécessitent des paramètres d'entrée, tels que, la densité de puissance radiante, la hauteur de la barrière et les caractéristiques des couches qui composent la structure à simuler [12-14].

Pour les électrons et les trous, nous avons utilisé la valeur de : 10^7 cm/s, comme vitesses de recombinaison en surface [4, 15]. La hauteur des barrières du contact avant ϕ_{b0} (TCO/p - couche) et du contact arrière ϕ_{bL} (n - couche/métal) ont été fixées à 1,9 eV et 0,02 eV [4,16], respectivement, ϕ_{bL} : Représente l'énergie d'activation de la couche n.

En ce qui concerne les énergies, pour la couche intrinsèque nous avons choisi la valeur 1,82 eV et pour les autre couche elle est fixée à 1,75eV.

IV.1.2. B. Paramètres d'entrées optiques

Le rayonnement solaire est pris : AM 1,5 avec une densité de puissance de 100 mW/cm^2 , la réflexion de la lumière à la face avant (*RF*) a été fixée à 0,02. Pour le contact arrière nous avons choisi la valeur de 0,8 pour rétro-réflexion (*RB*).

Le coefficient d'absorption, pour les différentes couches a été intégré dans le code AMPS-1D [20].

Tous les paramètres utilisés dans la simulation sont décrits dans le Tableau (IV.1) :

Parametres	a-Si: H(p)	a-Si: H(i)	a-Si: H(n)	Ref
Épaisseur (nm)	10	variable	10	
Constante diélectrique (EPS)	11.9	11.9	11.9	[17]
Mobilité d'électrons (MUN) ($\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$)	20	20	20	[17]
Mobilité des trous (MUP) ($\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$)	5	5	5	[18]
Densité d'effective (NC) (cm^{-3})	1.0×10^{20}	1.0×10^{20}	1.0×10^{20}	[19]
Densité d'effective (NV) (cm^{-3})	1.0×10^{20}	1.0×10^{20}	1.0×10^{20}	[19]
La densité du dopage (NA) (cm^{-3})	6.9×10^{19}	0	0	[19]
La densité du dopage (ND) (cm^{-3})	0	0	6.9×10^{19}	[19]
Bande de gap (EG) (eV)	1.75	1.82	1.75	
Les affinités des électrons (CHI) (eV)	3.8	3.8	3.8	[18]
Densité de queue de bande d'états (GDO-GAO) ($\text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$)	1.0×10^{21}	1.0×10^{21}	1.0×10^{21}	[17]
Energie caractéristique pour donneurs(ED) (eV)	0.05	0.05	0.06	
Energie caractéristique pour accepteurs (EA) (eV)	0.04	0.02	0.04	
Sections efficaces de capture des états donneurs (TSIG/ND)(TSIG/PD) e, h (cm^2)	$1 \times 10^{-15}, 1 \times 10^{-17}$	$1 \times 10^{-16}, 1 \times 10^{-17}$	$1 \times 10^{-15}, 1 \times 10^{-17}$	[18]
Sections efficaces de capture des états accepteurs, (TSIG/NA)(TSIG/PA) e, h (cm^2)	$1 \times 10^{-17}, 1 \times 10^{-15}$	$1 \times 10^{-17}, 1 \times 10^{-16}$	$1 \times 10^{-17}, 1 \times 10^{-15}$	[18]
Densité d'états des gaussiennes (NDG-NAG) (cm^{-3})	1.0×10^{17}	5.0×10^{15}	8.0×10^{17}	[17]
La déviation standard (EDONG) (eV)	0.15	0.15	0.15	[21]
L'énergie du pic gaussien du donneur (eV) (WSDG) (WASAG)	1.1	0.7	0.7	[17]
Sections efficaces de capture des états donneurs, (GSIG) e, h (cm^2)	$5.3 \times 10^{-14}, 1 \times 10^{-15} / 9 \times 10^{-15}, 8 \times 10^{-16}$	$1 \times 10^{-14}, 1 \times 10^{-15}$		[22]
Sections efficaces de capture des états accepteurs, (GSIG) e, h (cm^2)	$1 \times 10^{-15}, 5.3 \times 10^{-14} / 8 \times 10^{-16}, 9 \times 10^{-15}$	$1 \times 10^{-15}, 1 \times 10^{-14}$		

Tableau IV.1 : Les paramètres des différentes couches de la cellule photovoltaïque à base de silicium amorphe.

IV.1.3. Résultats de simulation et discussions

IV.1.3.1. La caractéristique : courant tension, de la cellule (p-i-n) en fonction de l'épaisseur De la couche intrinsèque

Après les simulations par le code de calcul AMPS- 1D en utilisant les paramètres enregistrés dans le tableau (IV.1) (Propriétés des couches et des interfaces par les défauts gaussiens) on trouve les caractéristiques électriques suivantes sur la figure(IV.2) :

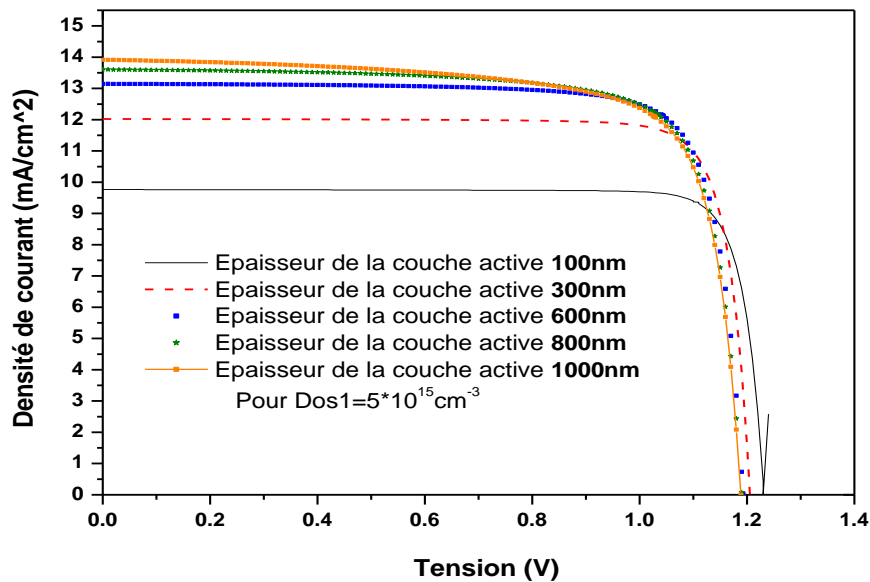


Figure IV.2 : Caractéristiques J(V) de la cellule (p-i-n) à simple jonction à base de (a-Si :H) en illumination AM1.5G simulée à l'aide l'AMPS-1D.

IV.1.3.2. L'effet de l'épaisseur de la couche active (a-Si :H) et la densité des états (DOS) Sur les performances de la cellule (p-i-n)

Dans le figure (IV.3), nous avons représenté les quatre variations des caractéristiques de sortie de la cellule simple jonction pin à base de silicium amorphe, en fonction de l'épaisseur et la densité des états DOS (Density of state) de la couche active intrinsèque i-(a-Si :H):

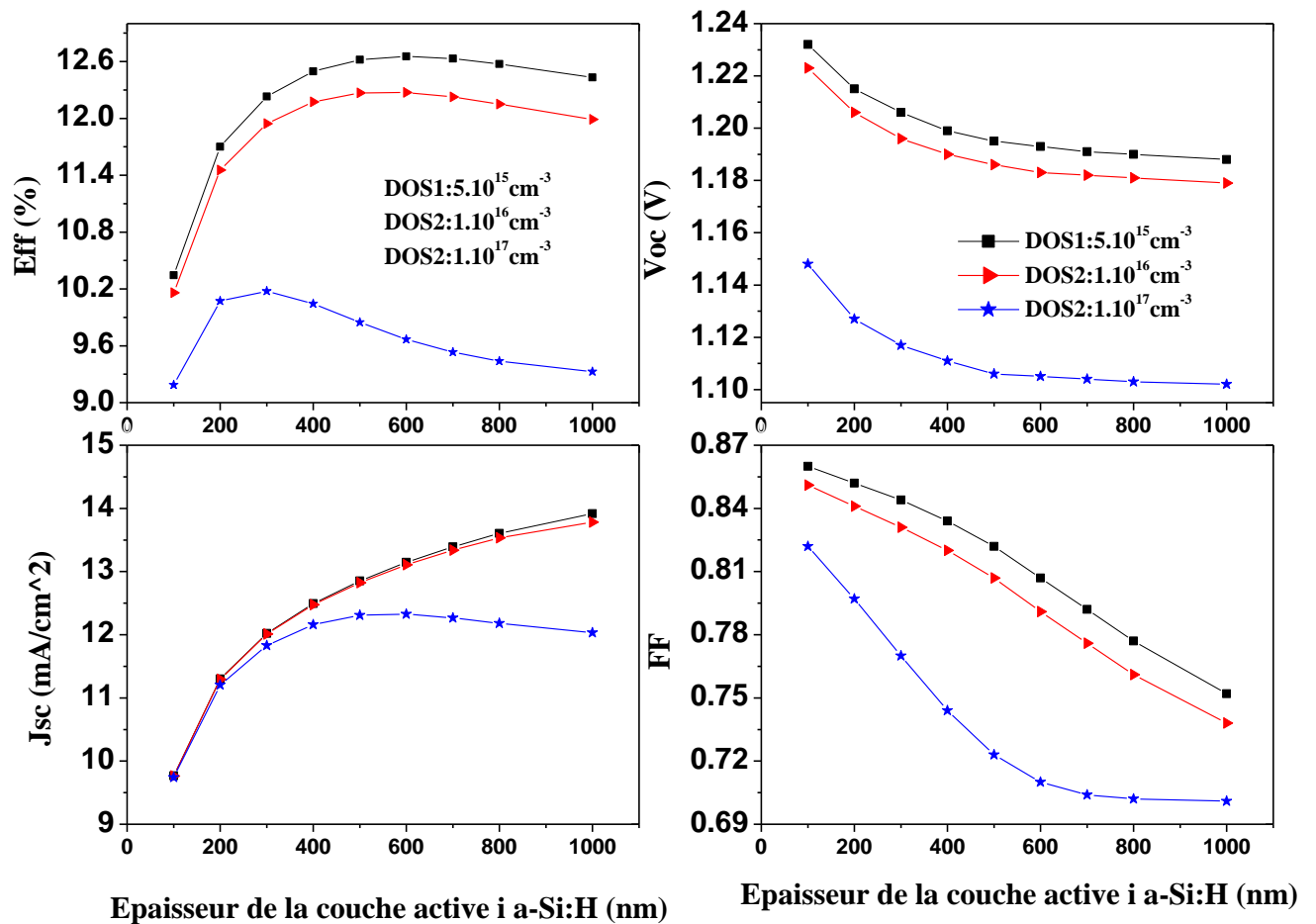


Figure IV.3 : Les Caractéristiques (J_{sc} , E_{ff} , FF , V_{OC}) de la cellule (p-i-n) à simple jonction à base de (a-Si:H) en conditions d'illumination AM1.5G simulée à l'aide l'AMPS-1D en fonction de l'épaisseur et la densité des états de la couche active (DOS 1: $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, DOS 2: 10^{16} cm^{-3} , DOS 3: 10^{17} cm^{-3}).

- Optiquement, l'épaisseur de la couche i doit être augmentée pour absorber suffisamment de lumière pour générer un photon courant à haute densité, mais électriquement, la couche i doit être maintenue suffisamment mince pour assurer un champ électrique interne élevé pour collecter les porteurs photosensibles et éviter une réduction sévère de l'efficacité induite par la lumière [23].

-On constate alors que l'augmentation de l'épaisseur de la couche active s'accompagne d'une diminution progressive de la tension V_{OC} et du facteur de forme FF , et d'une autre part d'une augmentation de la densité de courant de court-circuit $J_{sc} (I_{CC})$ et du rendement E_{ff} . Ce qui est en accord avec la littérature [4, 24].

-La diminution de V_{OC} avec l'épaisseur peut être provoquée par une augmentation de la densité de défauts dans la couche active. Une quantité plus importante de défauts affecte le champ électrique et par conséquent le pouvoir de collecte des porteurs. Quant à la diminution du facteur de forme FF , elle peut être due à l'augmentation de la résistance série R_s dans la cellule.

-On constate aussi que l'augmentation de la densité des états DOS de la couche active s'accompagne d'une diminution des quatre caractéristiques électriques. Ce qui est en accord avec la littérature [25].

IV.1.3.3. Optimisation du gap de mobilité de la couche active de la cellule solaire (p-i-n) à base de (a-Si : H)

Dans la figure(IV.4), nous allons simuler la cellule (p-i-n) en condition d'illumination AM1.5G à l'aide de l'AMPS-1D, en faisant varier le gap de mobilité de la couche active afin d'observer son effet sur les performances photovoltaïques.

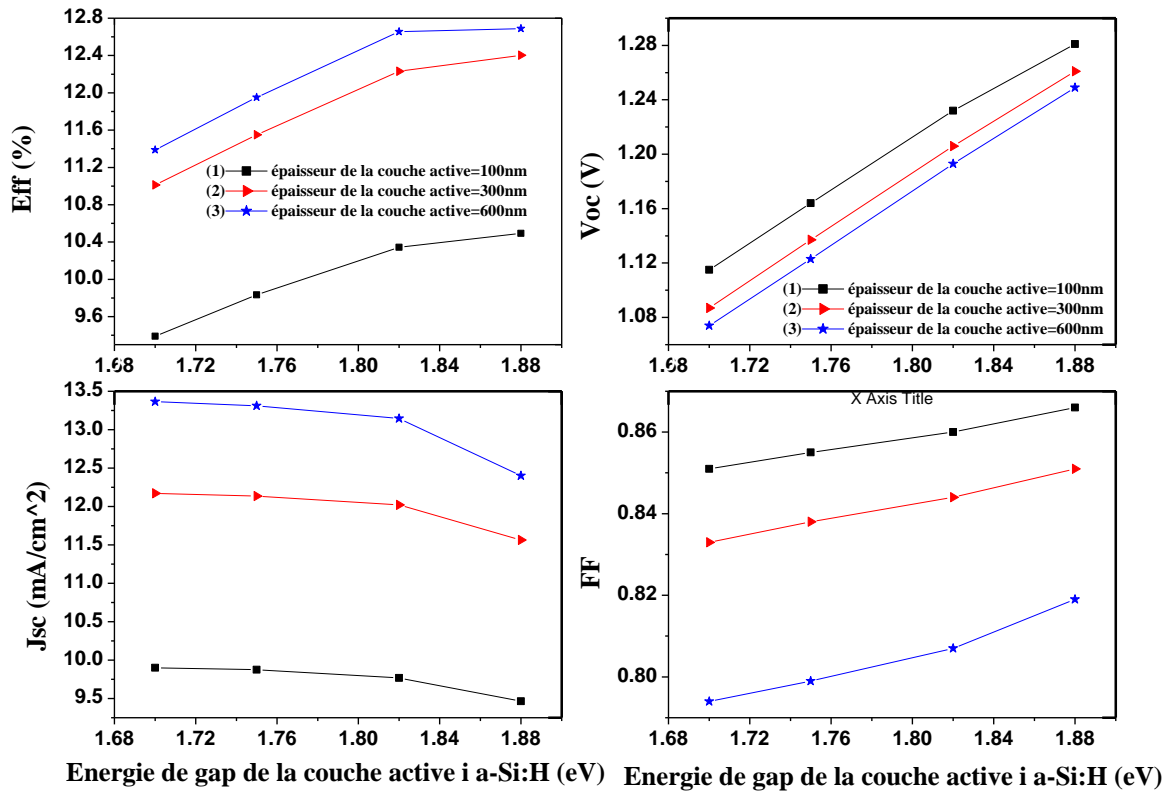


Figure IV.4 : Les Caractéristiques (J_{sc} , E_{ff} , FF , V_{OC}) de la cellule (p-i-n) à simple jonction à base de (a-Si:H) en conditions d’illumination AM1.5G simulée à l’aide l’AMPS-1D en fonction de l’épaisseur et l’énergie de gap de la couche active.

Les résultats montrent que la tension V_{OC} augmente avec l’accroissement du gap et cela d’une manière proportionnelle, ce qui est en accord avec la littérature [26,27]. Cela conduit à un meilleur taux de conversion. La Figure(IV.5). Donne les taux de recombinaison en conditions de circuit ouvert (à $V = V_{OC}$) pour les différentes valeurs de gap. On voit que l’accroissement du gap de mobilité se traduit par une baisse du taux de recombinaison dans la couche active, ce qui explique l’augmentation de la tension V_{OC} [28].

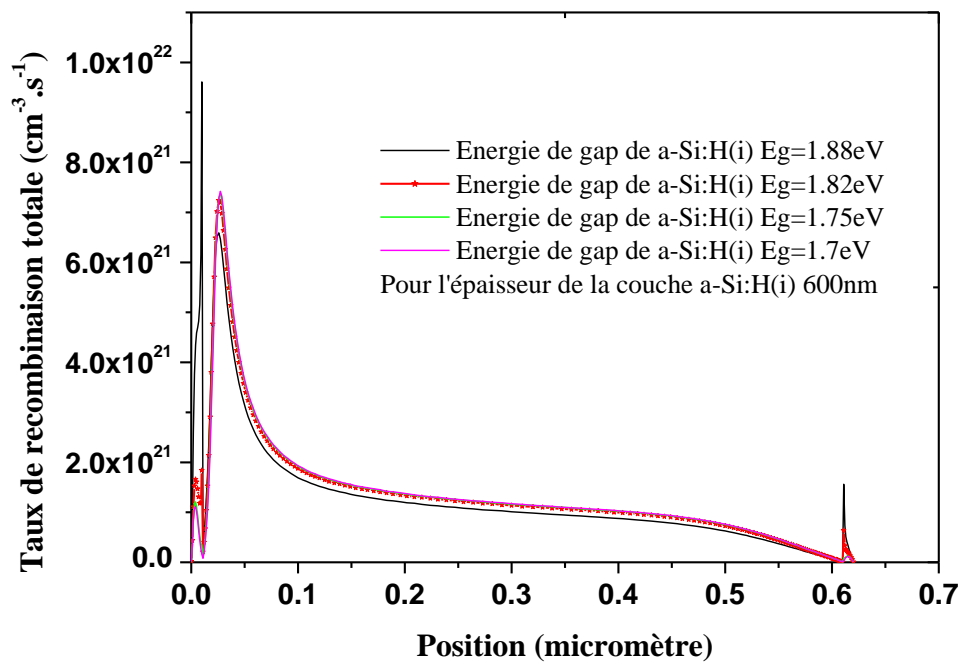


Figure IV.5 : Taux de recombinaison en condition de circuit ouvert ($V=V_{oc}$) à différentes valeurs de gap de la couche active E_g de la cellule (p-i-n) à simple jonction à base de (a-Si :H).

IV.1.3.4. Rendement quantique en fonction de l'épaisseur de la couche intrinsèque

L'efficacité quantique (EQ) est le rapport entre le nombre de porteurs collectés et le nombre de photons incidents. Il peut être utilisé pour déterminer si l'absorption de photons se produit réellement à une longueur d'onde donnée. La figure (IV.6), présente le rendement quantique d'une cellule (p-i-n) à base de silicium amorphe.

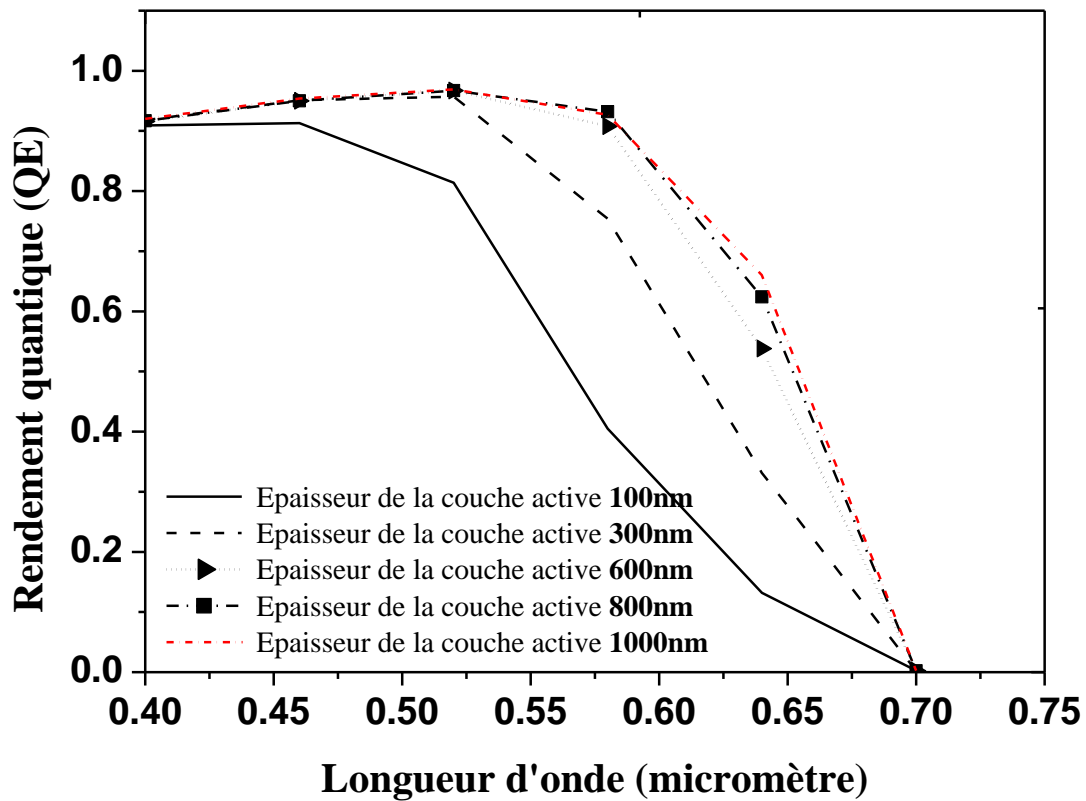


Figure IV. 6: Rendement quantique de la cellule solaire (p-i-n) à simple jonction à base de (a-Si :H) Simulée en conditions de court-circuit ($V_{oc}=0$) et d'illumination AM1.5G à l'aide de L'AMPS-1D.

D'abord, on voit que la cellule absorbe les longueurs d'onde comprises entre 0.4 μm et 0.7 μm de la partie visible du spectre solaire. Cela s'explique par le fait que le silicium amorphe (a-Si :H) possède un fort coefficient d'absorption dans cette partie du spectre.

Ensuite on remarque que l'augmentation de l'épaisseur de la couche intrinsèque induit une nette augmentation du rendement quantique dans le rouge. Ce résultat indique donc que les cellules solaire à base de (a-Si :H), leurs propriétés de transport sont assez bonnes pour permettre une bonne collecte des porteurs même lorsque l'épaisseur de la couche intrinsèque atteint 600nm.

IV.2. Simulation et optimisation de la deuxième cellule solaire binaire à hétérojonction (CdS/CdTe)

Le matériau tellurure de cadmium (CdTe) présente un faible gap de (1.5 eV) [29- 31], qui est une valeur idéale pour la conversion photovoltaïque du spectre solaire puisque elle s'approche de l'optimum théorique

$E_g = 1.4$ eV [32] et un coefficient d'absorption élevée, ce qui lui permet d'absorber 90% des photons incident sur une couche de seulement quelques microns. Les cellules de photovoltaïques " CdS/CdTe " ont un rendement inférieur à celle de la première génération. Cependant, ils ont une excellente résistance à la chaleur, une meilleure absorption du rayonnement dans le visible et le proche infrarouge, et leur durée de vie élevée.

Le semi-conducteur (CdTe) est la région active de l'hétérojonction (CdTe), dans laquelle la plupart des porteurs minoritaires en excès sont générés. L'émetteur (CdS) est utilisé comme fenêtre, son épaisseur est beaucoup plus petite que celle du (CdTe), et il a une large bande interdite donnée par (2.42 eV) [33, 34].

L'un des obstacles à leur développement à grande échelle est l'utilisation de matière toxique (cadmium et tellure), qui nécessite un certain processus de recyclage coûteux lors de leur recyclage.

Afin d'économiser le matériau de la cellule photovoltaïque et de résoudre les problèmes de pollution de l'environnement, et de réduire la perte de recombinaison des porteurs dans toute la couche d'absorption, des efforts ont été réalisés pour diminuer l'épaisseur de la couche d'absorption de (CdTe), à 1 μm . En conséquence, à ce jour, expérimentalement ils ont réalisé des rendements de 15.6 % et 11.5% avec des couches de (CdTe) de 0.7 et 1.2 μm d'épaisseur, cultivées par sublimation rapprochée (CSS) [35,36].

Quelle que soit la configuration de la cellule photovoltaïque en couche mince (CdS/CdTe) (superstrat ou substrat), la lumière pénètre dans la cellule à travers les couches de fenêtre TCO et (CdS) (type n). L'efficacité expérimentale de la cellule à jonction unique (CdS/CdTe) a été rapportée, jusqu'à présent, environ : 17% [37, 34], une efficacité de conversion d'environ : 18.6% d'une solaire (CdS/CdTe) incorporant des couches complexes de BSF et de TCO [38].

Puisque l'objectif principal de ce travail est d'explorer la possibilité d'améliorer l'efficacité des cellules solaires. Pour le deuxième cas de cellule à hétérojonction (CdS/CdTe), la proposition d'insérer une couche [(P⁺ CdTe) ou bien (a-Si :H)] hautement dopée entre la couche absorbante et le contact arrière (BSF) et optimiser les différentes couches de la cellule et ainsi, trouver l'ensemble des paramètres structurels caractérisant chaque couche constituant la cellule, afin de réduire la perte de recombinaison et augmenter le rendement [39].

IV.2.1. Description de la structure

Au début on a pris une cellule typique de (CdTe) qui est illustrée dans la figure IV.7.1, avec une couche de (CdTe) de type p (~1000nm) et une couche mince (~ 40nm) de (CdS) de type n pour former une hétérojonction.

La couche de (CdS) est fondamentalement transparente aux photons incidents, car son énergie de gap de 2.42eV. Les photons sont principalement absorbés par la couche de (CdTe), pour compléter la cellule, une couche TCO (Transparent Conductive Oxide) recouvre la couche (CdS) et se connecte aux contacts électriques. Les contacts électriques à l'arrière de la cellule peuvent être métalliques et peuvent couvrir toute la surface car la couche n'a pas besoin d'être transparente.

Pour améliorer le rendement on a fait une insertion d'une couche (P^+ CdTe) puis une couche de (a-Si :H)entre le contact arrière et la couche absorbante Voir figure(IV.7) .

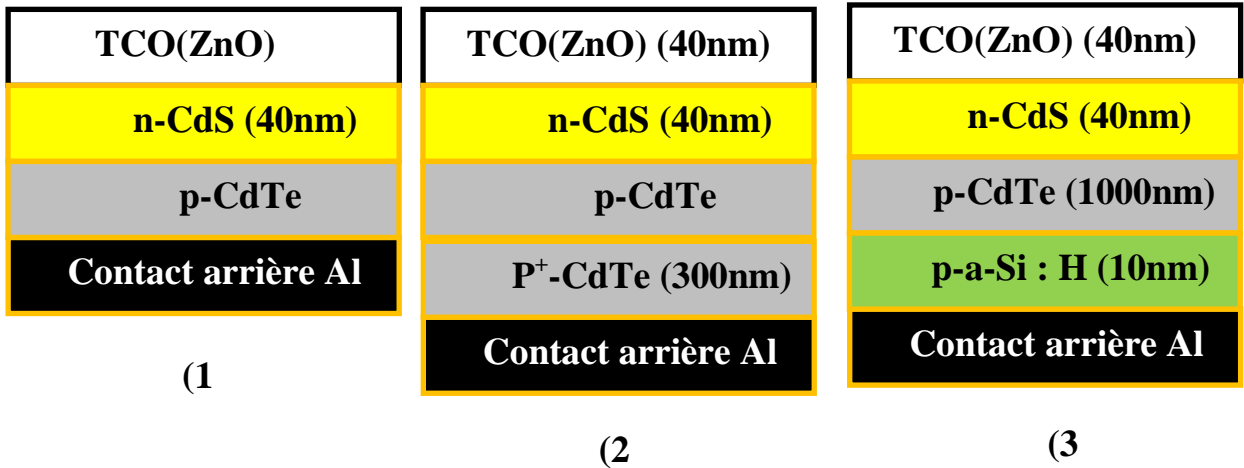


Figure IV. 7 : Représentation schématique des trois cellules solaire simple à base (CdTe).

Chapitre IV : Simulation et Optimisation des cellules solaires en technologie Couches minces

Les valeurs de différents paramètres de la cellule solaire utilisées dans AMPS-1D pour la simulation sont données dans le tableau (IV.2) :

Paramètres	nZnO	nCdS	PCdTe/P ⁺ CdTe	P(a – Si: H)	Ref
Épaisseur (nm)	40	40	1000 /300	10	[40-50]
Constante diélectrique	9	10	9.4	11.9	[48-40-41-50]
Mobilité d'électrons (cm ² V ⁻¹ s ⁻¹)	100	100	500	20	[48-46-43-41]
Mobilité des trous (cm ² V ⁻¹ s ⁻¹)	25	25	60	5	[48 -46-43-41]
Densité d'effective NC (cm ⁻³)	2.2 ×10 ¹⁸	2.2 ×10 ¹⁸	8.0 ×10 ¹⁷	2.5 ×10 ²⁰	[48 -41-41-41]
Densité d'effective NV (cm ⁻³)	1.8 ×10 ¹⁹	1.8 ×10 ¹⁹	1.8 ×10 ¹⁹	2.5 ×10 ²⁰	[48 -41-41-41]
La densité du dopage NA (cm ⁻³)	0	0	2.0 ×10 ¹⁴	1.0× 10 ¹⁹	[48 -47-49-50]
La densité du dopage ND (cm ⁻³)	1.0× 10 ¹⁸	2.0× 10 ¹⁷	0	0	[48 -47-49-50]
Bande de gap (eV)	3.37	2.42	1.5	1.88	[48 -39-46]
Les affinités des électrons (eV)	4.5	4.3	4.28	3.8	[48 -39-42-50]
Densité de queue de bande d'états (cm ⁻³ eV ⁻¹).	1.0×10 ¹⁴	1.0×10 ¹⁴	1.0×10 ¹⁴	1.0×10 ²¹	[48-48-48-17]
Densité d'états des gaussiennes (cm ⁻³)	1.0×10 ¹⁴	2.0×10 ¹⁶	2.0×10 ¹³	1.0×10 ¹⁷	[48-44-44-50]
Sections efficaces de capture des états donneurs, e, h (cm ²)	1.0×10 ⁻¹² , 1×10 ⁻¹⁷	1.0×10 ⁻¹² , 1×10 ⁻¹⁷	1.0×10 ⁻¹² , 1×10 ⁻¹⁵	1.0×10 ⁻¹⁴ , 1×10 ⁻¹⁵	[20]
Sections efficaces de capture des états accepteurs, e, h (cm ²)	1.0×10 ⁻¹⁷ , 1×10 ⁻¹²	1.0×10 ⁻¹⁷ , 1×10 ⁻¹²	1.0×10 ⁻¹⁵ , 1×10 ⁻¹²	1.0×10 ⁻¹⁵ , 1×10 ⁻¹⁴	[20]

Tableau IV.2 : Les paramètres des différentes couches .

Les diagrammes de bande de l'énergie correspondants de ces trois cellules sont représentés sur la figure (IV. 8). La différence de gap entre les couches donne la discontinuité de la bande de valence " $\Delta E_V = \Delta E_g + \Delta\chi$ " et de la bande de conduction " $\Delta E_C = \Delta\chi$ ". Afin de réduire la recombinaison provoquée par l'injection de trous de la couche d'absorption et de la couche tampon, il est nécessaire que ΔE_V soit négatif.

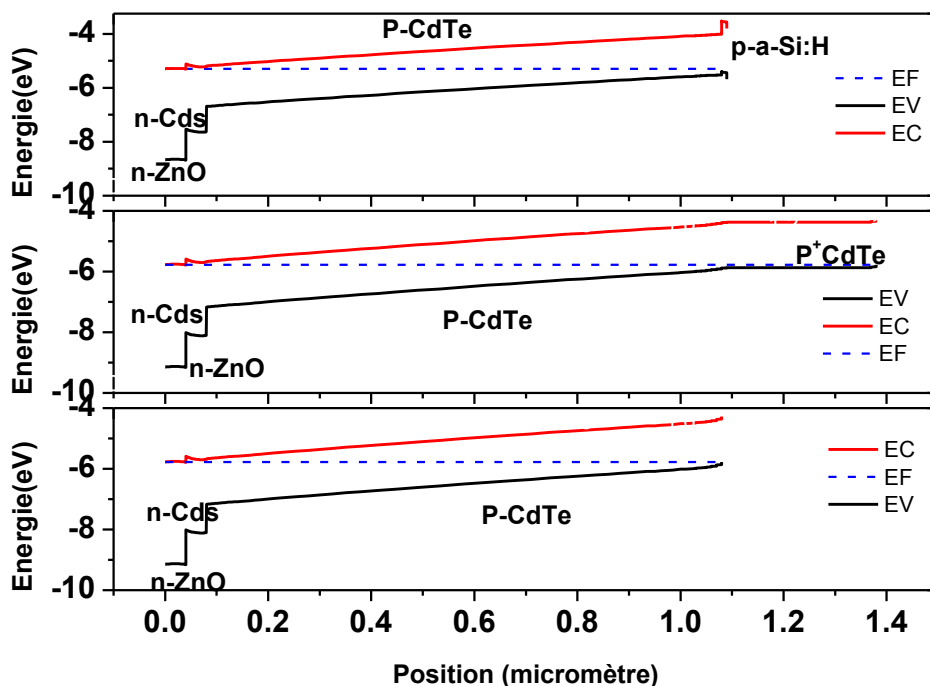


Figure IV.8 : Le diagramme des bandes trois cellules à l'équilibre thermodynamique.

IV.2.2. Résultats de simulation et discussions

Après les simulations par le code de calcul AMPS- 1D en utilisant les paramètres enregistrés dans le tableau (IV-2) qui illustre les propriétés des couches et des interfaces par les défauts gaussiens, on trouve les caractéristiques électriques suivantes :

IV.2.2.1. L'effet de l'épaisseur de la couche absorbante CdTe sur les performances des trois cellules

La couche absorbante doit être constituée d'un matériau à coefficient d'absorption élevé dans le domaine du visible. Par conséquent, il est préférable que la couche absorbante ait une bande interdite direct d'une valeur d'environ (1.1 - 1.7) eV.

Dans un premier temps, l'épaisseur de la couche absorbante (CdTe) a été modifiée pour déterminer l'épaisseur optimale de la structure à base de tellure de cadmium (CdTe). La simulation nous permet de tracer les caractéristiques courantes tensions (J , V), pour les cellules à éclairages AM1.5G, Voir figure (IV.9).

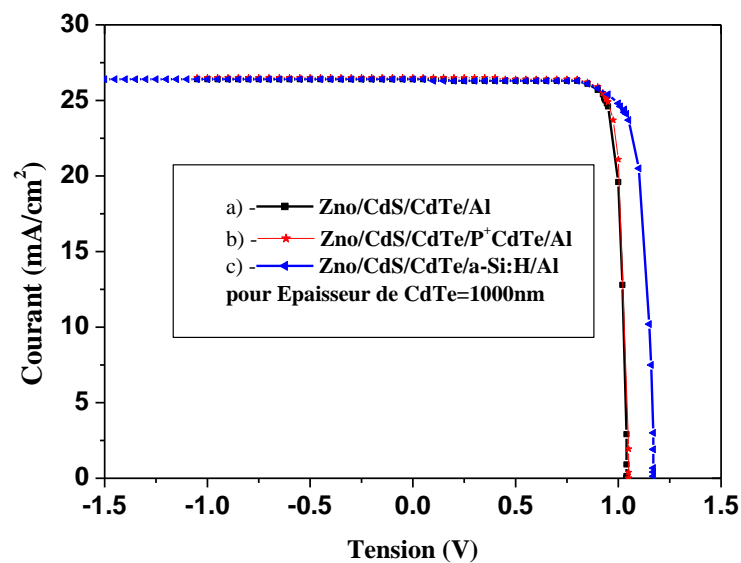


Figure IV.9 : Caractéristique courant tension sous AM1.5G illumination pour les trois cellules.

La figure (IV.9), représente les caractéristiques de courant tension pour les trois cellules solaires (CdS/CdTe) avec une couche (P⁺CdTe) et une couche (a-Si : H) ajoutée.

Nous observons que la tension augmente lorsque on a ajouté la couche de (a-Si : H) et elle reste inchangéable pour la couche (P⁺CdTe), mais le courant de court-circuit pour les trois cellules reste constant.

Dans la figure (IV.10), nous avons représenté les quatre variations des caractéristiques de sortie des trois cellules : 1-ZnO /CdS /CdTe /Al,

2- ZnO /CdS /CdTe/P⁺CdTe/Al,

3- ZnO /CdS /CdTe / a-Si:H /Al.

en fonction de l'épaisseur de la couche absorbante tellurure de cadmium (CdTe).

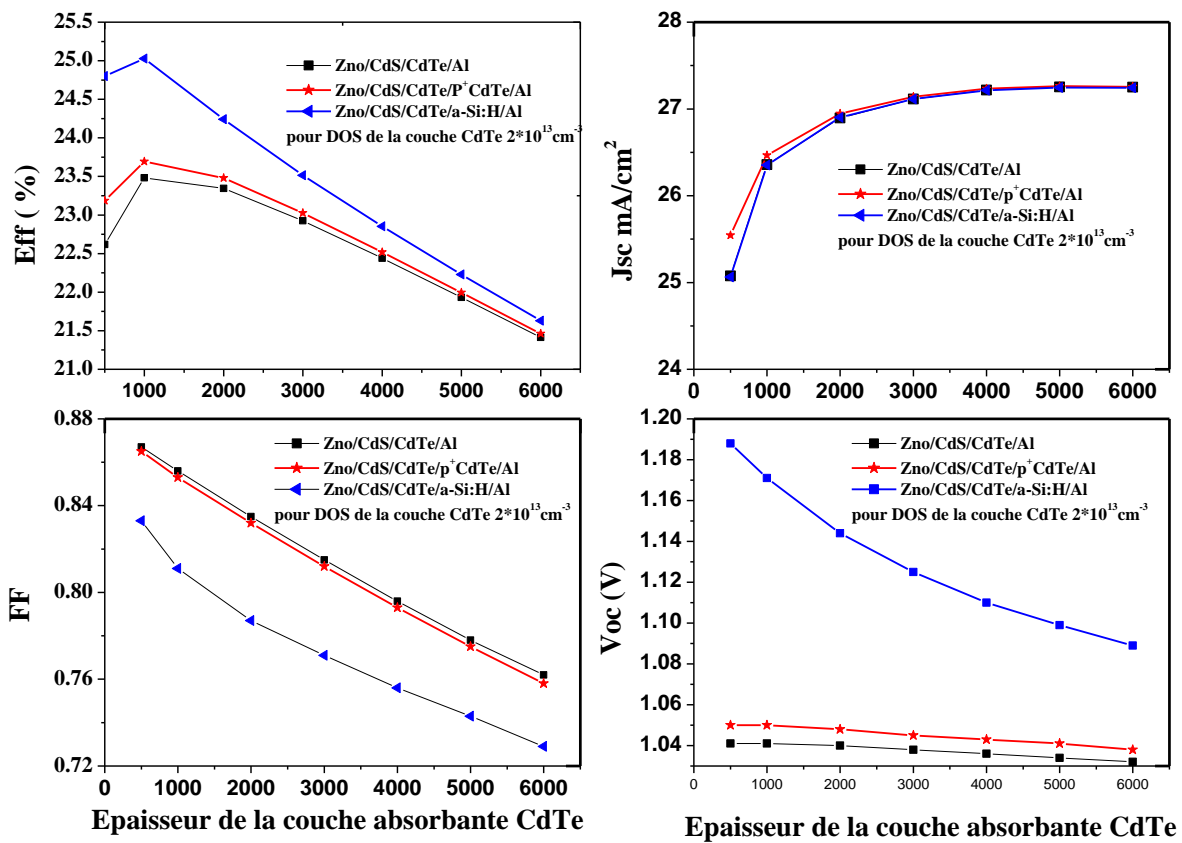


Figure IV.10 : Les Caractéristiques (J_{sc} , E_{ff} , FF , V_{OC}) des trois cellules en conditions d'illumination AM1.5G simulée à l'aide l'AMPS-1D en fonction de l'épaisseur de la couche (CdTe).

On remarque qu'autant que l'épaisseur de la couche absorbante (CdTe) augmente, l'efficacité de la cellule diminue. L'épaisseur optimale de la couche absorbante est d'environ 1000 nm. Pour cela, les rendements indiqués sont respectivement les suivantes pour les trois cellules :

Cellule1 : 23.482% .

Cellule2 : 23.693%

Cellule3 : 25.028%

- On remarque que l'ajoute de 10nm d'épaisseur de la couche (a-Si:H), le rendement E_{ff} à augmenter jusqu'à 25.028% par rapport à l'addition d'une épaisseur de 300 nm de (P⁺CdTe) .

- La tension en court circuit ouvert (V_{OC}) et le facteur de forme (FF) de la cellule (CdS/CdTe) est diminué avec l'augmentation de l'épaisseur de (CdTe). D'autre part, le courant de court-circuit J_{sc} (I_{cc}) augmente à mesure que l'épaisseur augmente.

L'augmentation de l'épaisseur de la couche absorbante permet à des photons de différentes longueur d'onde de lumière incidente, de traverser la couche absorbante et de contribuer à la génération de paires "électron- trous". On comprend que lorsque l'épaisseur diminue, J_{cc} diminue, ce qui peut être dû au processus de recombinaison au contact arrière. Le contact arrière sera très proche de la zone éclairée. Les électrons photogénérés sont facilement capturés par des défauts de contact arrière, augmentant ainsi la recombinaison.

En modifiant l'épaisseur de la couche d'absorption, le rendement quantique du substrat de la cellule solaire (figure IV.11a) est largement infectée, en particulier dans la région de la lumière rouge (longue longueur d'onde). On peut voir que l'efficacité quantique QE augmente à mesure que l'épaisseur de la couche d'absorption augmente. Cela est dû à l'augmentation du courant J_{sc} (I_{cc}). Plus l'épaisseur augmente, plus les photons incidents sont absorbés, plus les paires électron-trou sont générées et plus le rendement quantique augmente, et par rapport à la figure (IV.11b), le rendement quantique reste le même pour les trois cellules.

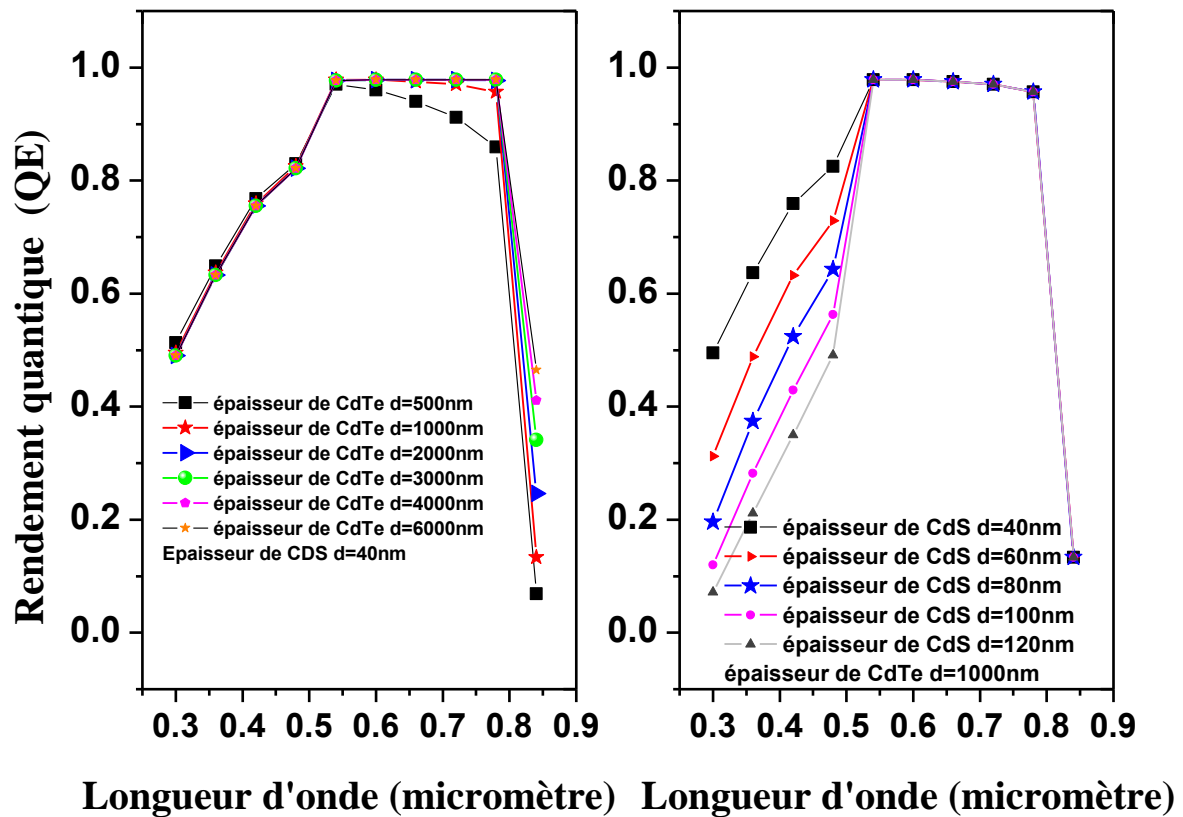


Figure IV. 11: Rendement quantique de la cellule solaire à hétérojonction simulée en Conditions de Court-Circuit ($V_{OC}=0$) et d'illumination AM1.5G à l'aide de L'AMPS-1D.

IV.2.2.2. L'effet de l'épaisseur de la couche (CdS) sur les performances des trois cellules.

La couche tampon est une couche située entre la couche absorbante et la couche d'oxyde conducteur transparent, elle joue un rôle très important dans la formation de la jonction à hétérojonction (CdS /CdTe), et son énergie de gap est égale à 2.42eV.

A l'interface (CdS /CdTe) , la discontinuité de la bande d'énergie est principalement due à l'affinité électronique des deux matériaux et à la largeur de la bande interdite. Le changement d'épaisseur du tampon (CdS) affectera la transmission d'électrons photogénérés avec des " spikes " aux raccordements de la bande de conduction. En fait, lorsque les affinités électroniques sont différentes, la barrière de potentiel à l'interface (CdS / CdTe) fera augmenter la résistance série.

En général, l'épaisseur optimale de la couche tampon (CdS) doit être de 25nm à 600nm [40]. Cependant, l'effet de la modification de l'épaisseur de la couche tampon du (CdS) sur les paramètres du substrat de la cellule solaire est très important pour la recherche. Dans ce travail de simulation, l'épaisseur de la couche tampon (CdS) varie de 20nm à 120nm. On a pris, une épaisseur de 40nm choisie arbitrairement.

D'après la simulation, la sensibilité de l'épaisseur du (CdS) est très élevée, cette augmentation pose un problème de transport de charge à l'interface, et tend à dégrader les performances de la cellule. Pour éviter ce problème, il est possible de jouer sur l'épaisseur de la couche (CdS).

Les valeurs d'affinités électronique pour (CdTe) et (CdS) servent seulement de références pour évaluer l'ordre de grandeur de ΔE_C . En effet, pour de fortes valeurs de discontinuité, le transport de charges devient plus difficile. La barrière de potentiel a tendance à empêcher les électrons photogénérés au contact arrière, de sorte que la recombinaison à travers l'état d'interface est considérablement augmentée. Pour des valeurs d'épaisseur de (CdS) faibles, la barrière est assez faible et il n'y a pas de polarisation.

Dans la figure (IV.12), nous avons représenté les quatre variations des caractéristiques de sortie des trois cellules : **1-ZnO /CdS /CdTe /Al,**

2- ZnO /CdS /CdTe/P⁺CdTe/Al,

3- ZnO /CdS /CdTe / a-Si:H /Al.

En fonction de l'épaisseur de la couche (CdS).

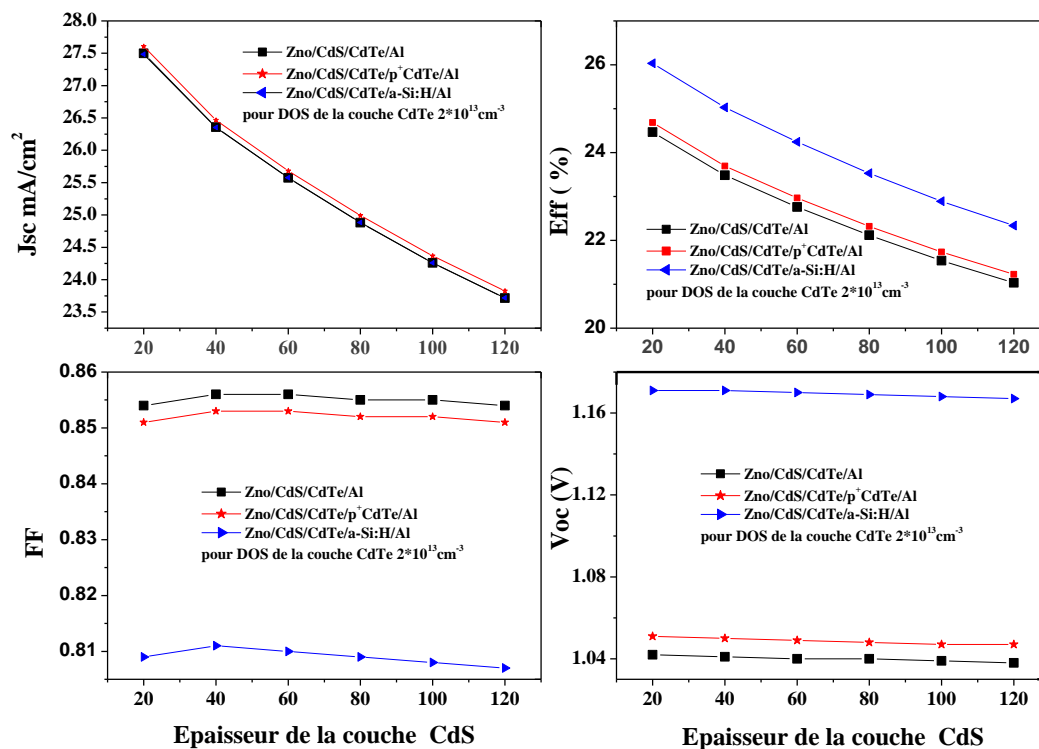


Figure IV.12 : Les Caractéristiques (J_{sc} , E_{ff} , FF , V_{OC}) des trois cellules en conditions d'illumination AM1.5G simulée à l'aide l'AMPS-1D en fonction de l'épaisseur la couche (CdS):

- On constate alors que l'augmentation de l'épaisseur de la couche sulfure de cadmium CdS s'accompagne d'une diminution progressive des caractéristiques (J_{sc} , E_{ff} , FF , V_{OC}). La diminution de courant de court-circuit est justifiée par la minimisation du passage des porteurs photo générés dans la barrière de potentiel à l'interface (CdS/CdTe).

-En effet, avec une faible valeur d'épaisseur de (CdS), la structure (ZnO/CdS/CdTe) permet d'obtenir un courant de court-circuit : J_{sc} (I_{cc}) plus élevée dans le spectre à faible longueur d'onde, obtenant ainsi un meilleur rendement quantique QE, Voir figure (IV.13).

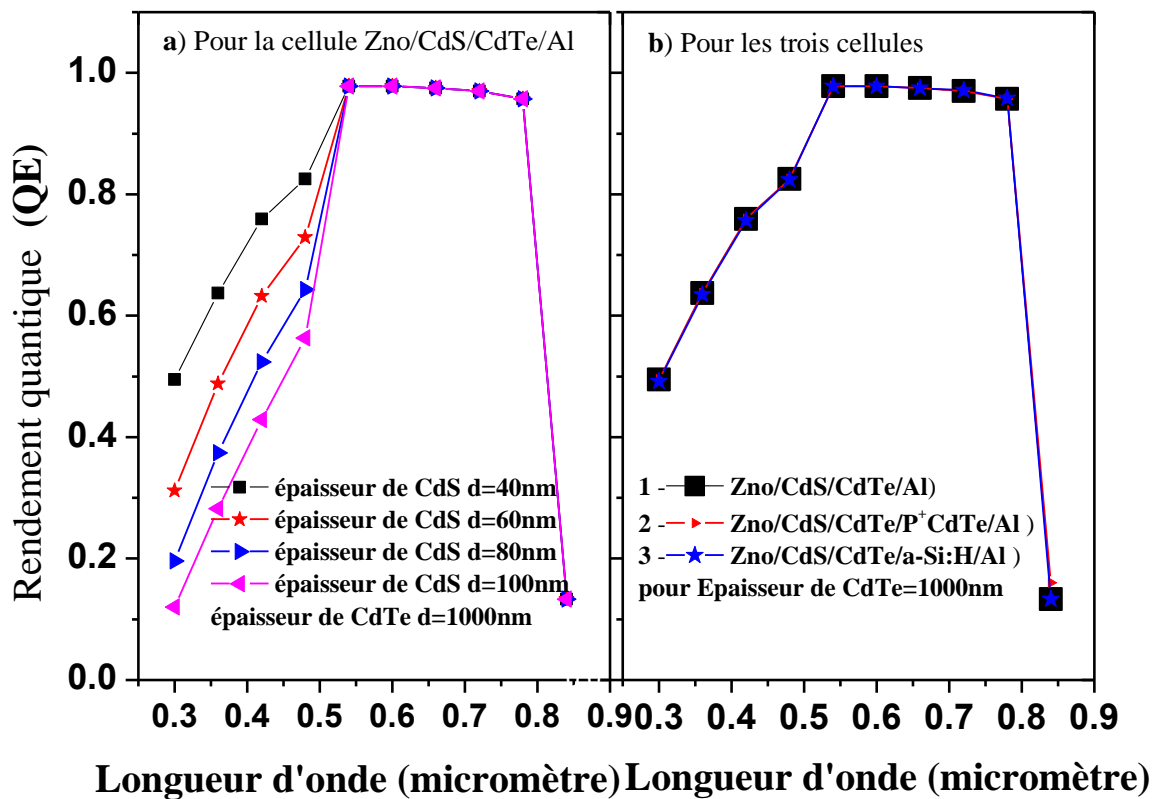


Fig. IV.13: Rendement quantique de la cellule solaire à hétérojonction simulée pour ($V_{OC}=0$) et d'illumination AM1.5G à l'aide de L'AMPS-1D.

IV.2.2.3. L'effet de l'épaisseur de la couche (ZnO) sur les performances des trois cellules.

Les OTC sont généralement de composés binaires (tel que l'oxyde de zinc (ZnO), le fluorure dopé SnO₂ (SnO₂: F).....) ou de composés ternaires (tel que MgIn₂O₄, Zn₂In₂O₅, etc.), utilisés comme couche conductrice et couche transparente dans une cellule solaire pour modifier ses performances. Le matériau (ZnO) est choisi comme couche fenêtre vue ses propriétés. Il est classé comme oxyde conducteur transparent (OTC), qui représente un aspect important dans les performances finales de la structure. Le (ZnO) doit être fortement dopée afin d'assurer un bon contact avec l'absorbeur.

La figure(IV.14), montre la dépendance des performances de la cellule sur l'épaisseur de la couche de fenêtre (ZnO). On note qu'il n'y a en fait aucun effet de l'épaisseur de la couche de fenêtre (ZnO), car l'énergie de gap de la couche de fenêtre est suffisamment importante (environ 3.4 eV), ce qui évite une éventuelle recombinaison des porteurs dans cette couche.

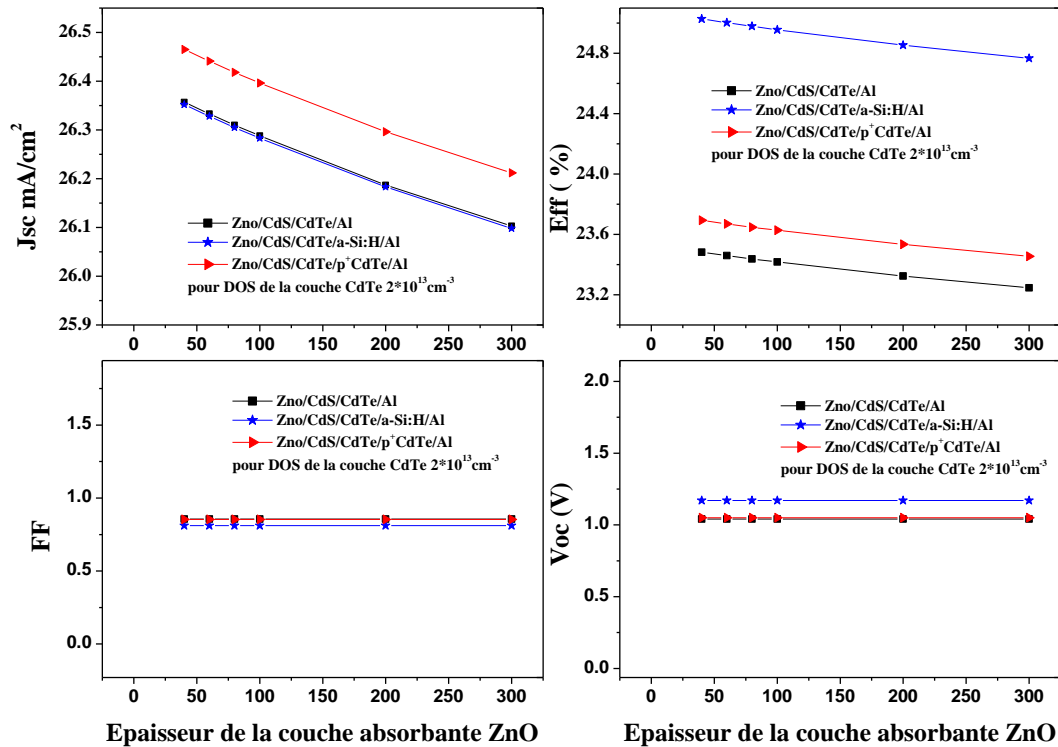


Figure IV.14 : Les Caractéristiques (J_{sc} , E_{ff} , FF , V_{OC}) des trois cellules en conditions d'illumination AM1.5G simulée à l'aide l'AMPS-1D en fonction de l'épaisseur la couche (ZnO).

L'influence de l'épaisseur de la couche de fenêtre (ZnO) sur le rendement quantique est illustré à la figure (IV.15) Veuillez noter que pour les courtes longueurs d'onde inférieures à $0.45 \mu\text{m}$ le rendement quantique diminuera au fur et à mesure que l'épaisseur augmentera. Ce phénomène peut être attribué à faible absorption de lumière dans la couche.

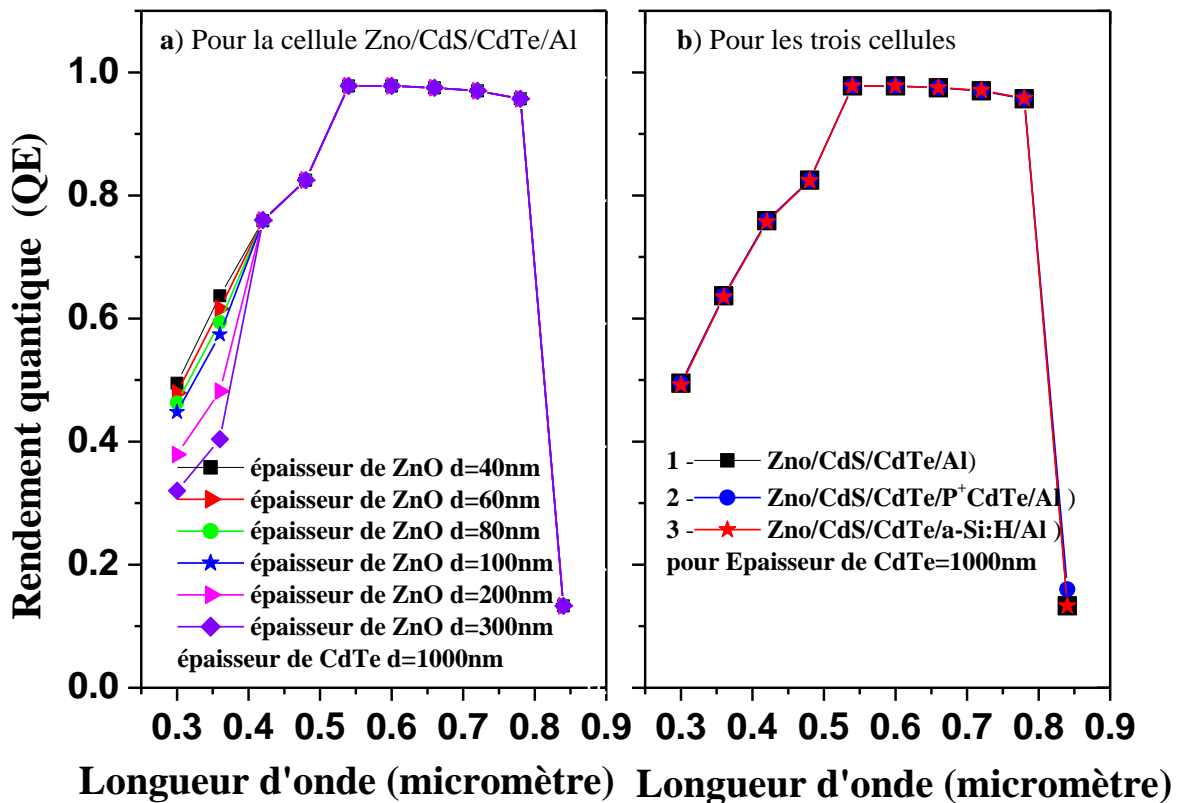


Figure IV. 15: rendement quantique de la cellule solaire à hétérojonction simulée en Conditions de Court-Circuit ($V=0$) et d'illumination AM1.5G à l'aide de L'AMPS-1D.

IV.2.2.4 L'effet de l'épaisseur de la couche active (CdTe) en fonction e la densité des états (DOS) sur les performances de la cellule (CdS/CdTe)

Dans la figure (IV.16), nous avons représenté les quatre variations des caractéristiques de sortie de la cellule hétérojonction (CdS/CdTe), en fonction de l'épaisseur et la densité des états DOS (Density of state) de la couche absorbante CdTe:

Comme il est évident plus que la densité des états DOS de la couche absorbante (CdTe) augmente, les quatres caractéristiques ($J_{sc}, E_{ff}, FF, V_{OC}$) de la cellule dimunués rapidement. L'épaisseur optimal de la couche absorbante est : 1000 nm, et pour cette valeur, les quatres caractéristiques ($J_{sc}, E_{ff}, FF, V_{OC}$) sont indiqués ci-dessous, pour les deux densité d'états DOS :

DOS1= $2.0 \times 10^{13} \text{ Cm}^{-3}$, $J_{sc}(I_{cc})=26.357 \text{ mA/cm}^2$; $E_{ff} = 23.482\%$; $FF = -0.856$; $V_{OC} = -1.041 \text{ V}$

DOS2= $2.0 \times 10^{15} \text{ Cm}^{-3}$, $J_{sc}(I_{cc})=26.282 \text{ mA/cm}^2$; $E_{ff} = 18.108\%$; $FF = -0.787$; $V_{OC} = -0.875 \text{ V}$

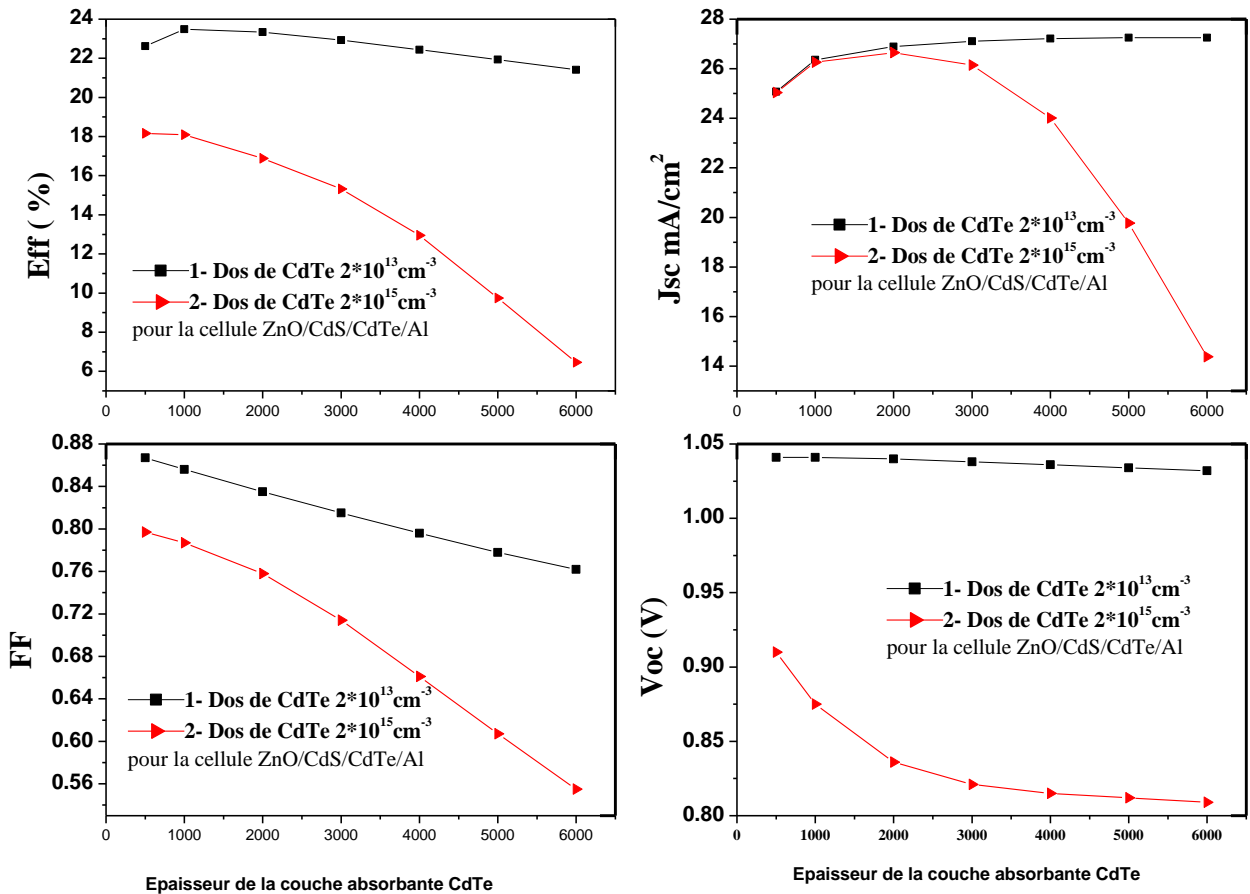


Figure IV.16 : Les Caractéristiques (J_{sc} , E_{ff} , FF , V_{OC}) de la cellule (CdS/CdTe) en conditions d'illumination AM1.5G simulée à l'aide l'AMPS-1D en fonction de l'épaisseur la couche (CdTe) et la densité des états de la couche active (DOS 1: $2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, DOS 2: $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$).

IV.3.Conclusion

Par rapport à d'autres sources d'énergie traditionnelles, l'amélioration de la compétitivité de la production d'énergie photovoltaïque passera inévitablement par l'amélioration du rendement de conversion des cellules solaires tout en réduisant leurs coûts de production. Une nouvelle structure doit être développée pour atteindre un rapport d'efficacité de conversion et coût de production admissible.

Dans ce chapitre, l'objectif est d'optimiser les cellules solaires en technologie couche mince à base de silicium amorphe (a-Si :H) et des cellules à base des matériaux binaires (CdS, CdTe) selon la méthode V_{OC} pour obtenir un meilleur rendement de conversion photovoltaïque. Il s'agit d'optimiser les paramètres physiques du matériau et la structure de la cellule solaire en augmentant ainsi la tension V_{OC} et le rendement de conversion. L'optimisation est faite par simulation à l'aide du logiciel AMPS-1D.

D'abord nous avons étudié une cellule solaire à simple jonction (p-i-n) à base de silicium amorphe. Notre objectif était de déterminer l'effet de l'épaisseur et la densité des défauts DOS de cette couche, à base de silicium hydrogéné (a-Si : H) et également l'effet de l'énergie de gap sur les performances de la cellule. D'un autre côté nous avons trouvé l'ensemble des paramètres structurels caractérisant la cellule.

Les résultats de simulation ont montré que, pour la couche active, la meilleure valeur de l'épaisseur, et pour des raisons d'application technologiques, doit être de l'ordre de 300 nm-600nm. En plus, les meilleures valeurs de la densité des états (DOS), qui conduisent à des paramètres de sortie efficaces de la cellule sont compris entre 5.10^{15}cm^{-3} et 10^{16}cm^{-3} . Et pour l'énergie de gap est $E_g(i)=1.82 \text{eV}$.

Et pour une épaisseur fixe : 600nm et une densité des états 5.10^{15}cm^{-3} , les résultats obtenues par cette optimisation, sont: $V_{oc} = 1.193 \text{ V}$, $J_{sc} (I_{cc})=13,145 \text{ mA/cm}^2$, $FF=80.07 \%$ et le rendement de conversion énergétique est $E_{ff}=12.655\%$.

Ces résultats sont publiés dans le journal : **Transactions on Electrical and Electronic Materials**, sous titres : **Numerical Simulation and Optimization of the Performances of a Solar. Cell (p-i-n) Containing Amorphous Silicon Using AMPS-1D**. DOI 10.1007/s42341-020-00262-4, **2020**.

Par la suite, nous avons étudié une cellule à hétérojonction (CdS/CdTe). L'objectif principal de cette partie est d'explorer la possibilité d'améliorer l'efficacité des cellules solaires à

Chapitre IV : Simulation et Optimisation des cellules solaires en technologie Couches minces

hétérojonction CdS/CdTe avec l'insertion d'une couche (P^+ CdTe où bien a-Si :H) hautement dopée entre la couche absorbante et le contact arrière (BSF), et de déterminer l'effet de l'épaisseur des couches (ZnO - CdS - CdTe) et bien sûr trouver l'ensemble des paramètres structurels caractérisant la cellule, afin de réduire la perte de recombinaison et ainsi augmenter le rendement.

Les résultats de simulation ont montré que la meilleure valeur de l'épaisseur pour la couche absorbante (CdTe) est de 1000 nm et pour la couche tampon (CdS) est entre 20 et 60nm.

La densité des états est $DOS1 = 2.0 \times 10^{13} \text{ Cm}^{-3}$ pour les cellules :

- 1- ZnO/CdS/CdTe/Al.
- 2- ZnO/CdS/CdTe/ P^+ CdTe/Al.
- 3- ZnO/CdS/CdTe/a-Si :H/Al

sont:

$$J_{sc}(I_{cc}) = 26.357 \text{ mA/cm}^2; E_{ff} = 23.482\%; FF = -0.856; V_{CO} = -1.041V.$$

$$J_{sc}(I_{cc}) = 26.465 \text{ mA/cm}^2; E_{ff} = 23.693\%; FF = -0.853; V_{OC} = -1.050V.$$

$$J_{sc}(I_{cc}) = 26.352 \text{ mA/cm}^2; E_{ff} = \mathbf{25.028\%}; FF = -0.811; V_{OC} = -1.171V.$$

IV.4. Références

- [1] S. Fonash, J. Arch., J. Hou, W. Howland, P. Mcelheny, A. Moquin, M. Rogosky, T. Tran, H. Zhu, F. Rubinelli, "A Manual for AMPS-1D for Windows 95/NT a One-Dimensional Device Simulation Program for the Analysis of Microelectronic and Photonic Structures", The Pennsylvania State University, (1997).
- [2] D.E. Carlson, C.R. Wronski, "Amorphous silicon solar cells", Appl. Phys. Lett., Vol. 28, pp. 671 – 673 (1976).
- [3] M. Farret, "Caractérisation et modélisation de matériaux et dispositifs à Base de silicium pour applications photovoltaïques", Sciences de l'ingénieur [physics] / Matériaux, (2018).
- [4] M. I. Kabir, Z. Ibrahim, K. Sopian, N. Amin, "Effect of Structural variations in Amorphous Silicon Based Single and Multi-junction Solar cells From Numerical Analysis", Solar Ener. Mater. Solar Cells 94, 1542, (2010).
- [5] S. Amtablian, "Du transfert de films minces de silicium monocristallin vers un Procédé cellule à Faible budget thermique", l'institut national des sciences appliquées de Lyon, 11 décembre (2008).
- [6] D.L. Staebler, C.R. Wronski, "Reversible Conductivity Change in Discharge-Produced Amorphous Si", Appl. Phys. Letts. 31, 292, (1977).

- [7] C. Shin, S. Iftiqar, J. Park, Y. Kim, S. Baek, J. Jang, M. Kim, J. Jung, Y. Lee, S. Kim, and J. Yi, "Optimization of intrinsic hydrogenated amorphous silicon deposited by very high-Frequency plasma-enhanced chemical vapor deposition using the relationship between Urbach energy and silane depletion fraction for solar cell application", *Thin Solid Films* 547, 256,(2013).
- [8] T. Matsui, H. Sai, T. Suezaki, M. Matsumoto, K. Saito, I. Yoshida, and M. Kondo, "Development of Highly Stable and Efficient Amorphous Silicon Based Solar Cells ", in *28th European Photovoltaic Solar Energy Conference*, pp. 2213–2217,(2013).
- [9] B. Vet and M. Zeman, "Relation between the Open-Circuit Voltage and The Band Gap Of Absorber and Buffer layer in a-Si: H Solar cells", *Thin Solid Films*, 516(20) :6873–6876, (2008).
- [10] A. Belfar and H. Ait Kaci, "ITO/P+nc-Si:H Contact Barrier effects On n-i- p'-p Silicon Solar Cells performances", *Materials Science and Engineering, B* 178, pp. 438– 442, (2013).
- [11] L. Guo, J. Ding, J. Yang, Z. Ling, G. Cheng, N. Yuan and S. Wang, "Nanostructure, Electrical and Optical Of p-Type Hydrogenated nanocrystalline Silicon Films", *Vacuum*, Vol. 85, N°6, pp. 649 – 658, (2011).
- [12] H. Heriche, Z. Rouabah, N. Bouarissa, "High-efficiency CIGS solar cells with Optimization of layers thickness and doping ", *Optics* 127 , 11751,(2016).
- [13] H. Heriche, Z. Rouabah, N. Bouarissa, "New ultra -thin CIGS structure solar cells using SCAPS simulation program ", *Intern. J. Hydr. Ener.* 42 ,9524, (2017).
- [14] A. Gueddim, N. Bouarissa, A. Naas, F. Daoudi, N. Messikine, « Characteristics and Optimization of ZnO/CdS/CZTS photovoltaic solar cell», *Appl. Phys.* A124 ,199, (2018).
- [15] M. Ikbal Kabir , Seyed A. Shahahmadi , Victor Lim, Saleem Zaidi, Kamaruzzaman Sopian, and Nowshad Amin, "Amorphous Silicon Single- Junction Thin-Film Solar Exceeding 10% Efficiency by Design Optimization", *International Journal Of Photo energy* ,ID 460919, (2012).
- [16] Md. Feroz Ali, Md. Faruk Hossain, "Improving Efficiency Of an Amorphous Silicon (p-a-Si:H/i-a-Si:H/n- a-Si:H) Solar Cell by Affecting Band-gap and Thickness From Numerical Analysis", *ISSn: 2394- 3661*, volume -2, Issue-12, December (2015).
- [17] U. Dutta, P. Chatterjee, "The open Circuit Voltage in Amorphous Silicon p-i-n Solar Cells and it's Relation Ship To Material, Device and Dark Diode Parameters", *J. Appl. Phys.* 96, 2261 (2004).
- [18] X. Wen, X. Zeng, W. Liao, Q. Lei, S. Yin, "An Approach For Improving the carriers Transport Properties Of a-Si:H/C-Si Hetero-junction Solar Cells with efficiency Of More Than 27% ", *Solar Energy* 96 ,168,(2013).

Chapitre IV : Simulation et Optimisation des cellules solaires en technologie Couches minces

- [19] L. Shen , F. Meng , Z. Liu , "Roles Of the Femi Level Of Doped a-Si:H and Band Offsets At a-Si:H/C-Si Interfaces in n-type HIT Solar Cells", *Solar Energy* 97 ,168,(2013).
- [20] M. Burgelman , K. Decock, J. Verschraegen, A. Niemegeers, S. Degrave "Programme de simulation SCAPS-1D pour cellules solaires à couches minces développé à ELIS", Université de Gand, Belgique,(Scaps-2.5), (2005)
- [21] B.M. Omer, F.A. Mohammed, A. Seed Ahmed Mahgoub," Simulation Study on the Open-Circuit Voltage of Amorphous Silicon p-i-n Solar Cells Using AMPS-1D", *Journal of Nano - and Electronic Physics*, Vol. 6 No 1, 01006(4pp) (2014).
- [22] L. Shen , F. Meng , Z. Liu,"Roles of the Fermi level of doped a-Si:H and band offsets at a-Si:H/c-Si interfaces in n-type HIT solar cells", *Solar Energy* 97 ,168–175,(2013).
- [23] F. Hammour, A. Belfar ,H. Aït-kaci " Effet des caractéristiques de la couche tampon p-nc-SiOx :H sur les performances d'une cellule solaire à base de aa-Si :H", *Revue des Energies Renouvelables SIENR'18*, Ghardaïa ,7 - 15, (2018).
- [24] A. Fantonia, M.Vieraa, R.Martinsb, " Influence Of The Intrinsic Layer Characteristics On a-Si:H p-i-n Solar Cell Performance Analyzed by means of a computer simulation", *Solar Energy Materials & Solar Cells* 73 ,151–162, (2002).
- [25] A. Fantoni, M. Viera, R. Martins, " Influence of the intrinsic layer characteristics on a-Si:H p-i-n solar Cell Performance Analyzed by Means Of a Computer Simulation ",*Solar Energy Materials & Solar Cells* 73,) 151,(2002).
- [26] J. M. Pearce, R. J. Koval, Andre S. Ferlauto, R.W. Collins, C.R. Wronski, J.Yang, and S. Guha," Dependence of Open-Circuit Voltage in Hydrogenated Protocrystalline Silicon Solar cells on Carrier Recombination in p/I interface and Bulk region", *Applied Physics Letters*, 77 (19), (2000).
- [27] N. Jian, Z. J.Jun, C.Yu, W. X.Bao, L. Chao, C. X.Liang, G. X.Hua, Z. Ying, "With the objective of increasing the optical band gap and obtaining a higher Voc for a p-i-n solar cell, intrinsic a-Si:H films were deposited under different", *Chin. Phys. B* , Vol. 20, No. 8 ,087309,(2011).
- [28] A. Belfar, " Simulation study of the a-Si:H/nc-Si:H solar cells performance sensitivity to the TCO work function, the band gap and the thickness of i-a-Si:H absorber layer ",*Solar Energy* 114 ,408– 417,(2015).
- [29] X. Wu, "High-efficiency polycrystalline CdTe thin-film solar cells ", *Sol. Energy* 77 ,803– 814,(2004).
- [30] S.P. Albright, V.P. Singh and J.F. Jordan, « Junction characteristics of CdS/CdTe solar cells », *Sol. Cells*, 24 ,43–56,(1988).
- [31] K.Mitchell, A. Fahrenbruch, R. Bube, « Photovoltaic determination of optical-absorption

Chapitre IV : Simulation et Optimisation des cellules solaires en technologie Couches minces

- coefficient in CdTe », J. Appl. Phys, 48, 829,(1977).
- [32] Y.B. He, W. Kriegseis, B.K. Meyer and A. Polity, « Heteropitaxial growth of CuInS₂ thin films on sapphire by radio frequency reactive sputtering », App. Phys. Lett. Vol. 83, pp. 1743, (2003).
- [33] A. Bosio, N. Romeo, S. Mazzamuto, V. Canevari, «Polycrystalline CdTe Thin Films For photovoltaic Applications », Prog. Cryst. Growth Char. Mater. 52 , 247–279,(2010).
- [34] J. Britt, C. Ferekides, «Thin-film CdS/CdTe solar cell with 15.8% efficiency», Appl. Phys. Lett. 62,2851–2852(1993),.
- [35] N. Amin, T. Isaka, T. Okamoto, A. Yamada, M. Konagai, « Prospects Of Thickness Reduction Of The CdTe Solar cells Towards 1 μ m », Jpn. J. Appl. Phys. 38 (8), 4666, (1999).
- [36] N. Amin, T. Isaka, A. Yamada, M. Konagai, " Highly Efficient 1 μ m Thick CdTe Solar Cells with Textured TCOs", Solar Energy Materials and Solar Cells 67(1):195-201,(2001).
- [37] First Solar Inc <http://investor.firstsolar.com/releasedetail.cfm?ReleaseID=828273>,(2014).
- [38] N. Amin, M. A .Matin, M. M. Aliyu, M. A. Alghoul, M .R .Karim and K .Sopain, "Prospects of Back Surface Field Effect in Ultra-Thin High-Efficiency CdS/CdTe Solar Cells from Numerical Modeling", Int. J. Photo energy, pp. 1-8, (2010).
- [39] N. A. Jahan, M. Minhaz Ul Karim , M. M.Hossain "A High Efficiency Ultra-Thin (1.8 μ m) CdS/CdTe p-i-n Solar Cell with CdTe and Si As BSF Layer "Advances in Science, Technology and Engineering Systems Journal Vol.3, No.1, 213-217 (2018).
- [40] H. Al-shamiri, M. Sid-Ahmed, F. Abdu Hezam "Simulation of Performance of Cadmium Telluride Solar Cell Using AMPS-1D Programrop ZnO 3.37 4.5 "Journal of Photonic Materials and Technology,volume2, issue(2): 14-19, (2016).
- [41] M. Mahabub Alam Moon, M. Ferdous Rahman, J. Hossain , A. Ismail ,"Comparative Study of The Second Generation a-Si:H ,CdTe, and CIGS Thin-Film Solar Cells", Advanced Materials Research Submitted: 2019-02-13 ISSN: 1662-8985,Vol.1154,pp102-111,(2019).
- [42] B.E. McCandless, J.R. Sites," Handbook of Photovoltaic Science and Engineering", John 4.28, (2011).
- [43] M. Aven, J. Prener, J. Wiley and Sons "Physics and Chemistry of II-VI Compounds ", New York,(1967).
- [44] H. P. Mahabaduge , W. L. Rance, J. M. Burst, M. O. Reese, D. M. Meysing, C. A. Wolden, J. Li, J. D. Beach, T. A. Gessert, W. K. Metzger, S. Garner, and T. M. Barnes, "High-efficiency, flexible CdTe solar cells on ultra-thin glass substrates", Cite as: Appl. Phys. Letts. 106, 133501, (2015).

- [45] I.Tinedert , A. Saadoune , I. Bouchama , M. Saeed "Numerical modelling and optimization of CdS/CdTe solar cell with incorporation of Cu₂O HT-EBL layer", *Optical Materials* 106 , 109970, (2020).
- [46] M. A. Matin, N. Amin, A. Zaharim, K. Sopian, "Ultra-thin High Efficiency CdS/CdTe Thin Solar Cells from Numerical Analysis", *Proceeding Of the 8th WSEAS International Conference on Non-Linear Analysis, Non Linear Systems and chaos, La Laguna, Spain*, pp.338-344, July1-3, (2009).
- [47] M. A. Matin,¹ M. U. Tomal,¹ A. M. Robin,¹ and N. Amin², "Numerical Analysis of Novel Back Surface Field for High Efficiency Ultrathin CdTe Solar cells", *international Journal of Photo energy*, Volume 2013, Article ID652695,(2013).
- [48] S.Ahmed, A. Aktar, Md. F. Rahman, J.Hossain, Abu Bakar Md. Ismail, "A Numerical Simulation Of High Efficiency CdS/CdTe Based Solar Cell Using NiO HTL and ZnO, TCO", *Optic- International Journal for Light and Electron Optics*,223,165625, (2020).
- [49] C. Huang, W. Chuang, "Dependence of performance parameters of CdTe Solar Cells on Semiconductor properties studied by using SCAPS-1D", *Science-Direct*, 1- 6, (2015).
- [50] X. Wen, X. Zeng , W .Liao , Q Lei , S. Yin , "An approach for improving the Carriers Transport properties of a-Si:H/ C-Si hetererojunction solar cells With efficiency of more Than 27% " , *Solar energy* 96,168-176,(2013).

Conclusion générale

Conclusion générale

L'énergie solaire est la source d'énergie la plus prometteuse et la plus puissante parmi les sources d'énergie renouvelables. L'électricité photovoltaïque (PV) est produite en utilisant des cellules PV pour convertir directement la lumière du soleil en énergie électrique. Le but de ce travail est d'étudier l'amélioration des performances des matériaux semi-conducteurs utilisés dans les cellules photovoltaïques. Les cellules solaires en couches minces intégrant le silicium amorphe, le tellure de cadmium (CdTe) et le sulfure de cadmium (CdS) suscitent un intérêt croissant de la part des scientifiques et industriels motivés par la réduction des coûts de fabrication. De plus cette technologie offre la possibilité d'utiliser une grande variété de substrats peu coûteux comme le verre ainsi que des substrats flexibles.

Dans le premier chapitre, nous avons présenté un ensemble d'informations générales sur le domaine de la conversion photovoltaïque ainsi que le principe de fonctionnement des cellules photovoltaïques, leurs principales caractéristiques et les limites du modèle théorique. Et nous avons fini par les différentes filières photovoltaïques.

Dans le deuxième chapitre, nous avons présenté les propriétés cristallographiques, physiques et optiques des matériaux de la filière silicium (Le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H)), les semi-conducteurs binaires de groupe (II.VI) (CdTe, CdS) et l'oxyde de Zinc (ZnO).

Le troisième chapitre a été consacré spécifiquement pour le code numérique AMPS-1D utilisé dans notre simulation. Ce code est adapté à la simulation de cellules solaires et conçu sur les équations de base décrivant les changements du potentiel et de la densité de courant des deux porteurs.

Enfin, dans le quatrième chapitre nous avons étudié par simulation, les propriétés électriques et optiques de deux types de cellules solaires à couches minces, le premier type est une simple jonction (P-i-n) à base de silicium amorphe et le second type (n-p) hétérojonction (CdS/ CdTe) sous l'éclairement AM1.5G en utilisant le logiciel l'AMPS-1D unidimensionnelle.

Tout d'abord, nous avons optimisé la cellule solaire à simple jonction (p-i-n) à base de (a-Si:H), les résultats de simulation ont montré que, pour la couche active, la meilleure valeur de l'épaisseur doit être de l'ordre de 300 nm-600nm. En plus, les meilleures valeurs de la densité des

Conclusion générale

états (DOS), qui conduisent à des paramètres de sortie (J_{sc} , E_{ff} , FF , V_{OC}) efficaces, est compris entre 5.10^{15}cm^{-3} et 10^{16}cm^{-3} , et pour l'énergie de gap $E_g(i)=1.82\text{eV}$.

Et pour une épaisseur fixe : 600nm et une densité des états 5.10^{15}cm^{-3} , les résultats obtenues par cette optimisation, sont: $V_{oc} = 1.193 \text{ v}$, $J_{sc} = 13,145 \text{ mA/cm}^2$, $FF=80.07 \%$ et le rendement de conversion énergétique est $E_{ff}=12.655\%$.

Ensuite, nous avons optimisé la cellule solaire à hétérojonction (n/p) (CdS / CdTe) :

- Les résultats obtenus indiquent que la réduction de l'épaisseur des couches CdS et CdTe améliore le rendement de la cellule, et que le rendement est plus sensible à l'épaisseur de la couche d'oxyde (ZnO).

Nous avons conclu aussi que l'augmentation de la densité des défauts DOS de la couche absorbante a une grande influence sur les caractéristiques de la cellule. L'épaisseur optimal de la couche absorbante est d'environ 1000nm. Pour un rendement et densités d'états DOS donnés comme suit:

$$\text{DOS1} = 2.0 \times 10^{13} \text{ Cm}^{-3}, E_{ff} = 23.482\%$$

$$\text{DOS2} = 2.0 \times 10^{15} \text{ Cm}^{-3}, E_{ff} = 18.108\%$$

L'insertion d'une couche fortement dopée ((a-Si :H) ou P^+ CdTe) entre la couche absorbante et la couche de contact arrière (BSF) a un effet bénéfique sur l'efficacité de la cellule, où le meilleur rendement pour une épaisseur de (CdTe)=1000nm, pour les trois cellules est le suivant:

$$\text{Cellule1 ZnO /CdS /CdTe /Al : } \eta = 23.482\% .$$

$$\text{Cellule2 ZnO /CdS /CdTe/P}^+\text{CdTe/Al : } \eta = 23.693\%$$

$$\text{Cellule3 ZnO /CdS /CdTe / a-Si:H /Al : } \eta = 25.028\%$$

On note que l'addition de la couche du silicium a bien amélioré le rendement qui a touché plus de 25 %. Et en fin , Les simulations ont montré également que la cellule solaire (p-i-n) à base de silicium amorphe absorbe les courtes longueurs d'onde du visible (400nm à 700nm) alors que la cellule (CdTe) absorbe un plus large spectre qui s'étend jusqu'aux grandes longueurs d'onde du rouge et proche de l'infrarouge (300nm à 840nm).

Résumé:

Les performances d'une cellule solaire dépendent des propriétés des matériaux qui les composent. Nos travaux sont basés sur la simulation des performances de deux cellules solaires en couche mince : l'une à simple jonction à base de silicium amorphe hydrogéné (a-Si: H) et l'autre à hétérojonctions (CdS/CdTe). Comme outil de calcul, nous avons utilisé le code AMPS-1D, développé par le professeur Fonash.

Les résultats de simulation, pour la cellule de silicium amorphe ont montré que, pour la couche active, la meilleure valeur de l'épaisseur de 300 nm-600nm. En plus, nos résultats de simulation ont montré que les meilleures valeurs de la densité des états (DOS), qui conduisent à des paramètres de sortie de la cellule sont compris entre 5.10^{15}cm^{-3} et 10^{16}cm^{-3} . Et l'énergie de gap est $E_g(i)=1.82\text{eV}$ et le rendement $\eta =12.655\%$ pour un épaisseur de la couche absorbante $E=600\text{nm}$.

En suite nous avons étudié la cellule à hétérojonction (CdS/CdTe). La simulation, a montré que, la meilleure valeur de l'épaisseur pour la couche absorbante (CdTe) est de 1000nm et pour la couche tampon (CdS) est entre 20 et 60nm, et le rendement est: $\eta =25.028\%$.

En fin , on conclut que la cellule solaire p-i-n à base de silicium amorphe absorbe les courtes longueurs d'onde du visible (400nm à 700nm) alors que la cellule (CdTe) absorbe un plus large spectre qui s'étend jusqu'aux grandes longueurs d'onde du rouge et proche de l'infrarouge (300nm à 840nm).

Abstract:

The performance of a solar cell depends on the properties of the materials it is made of. Our work is based on the performance simulation of two thin-film solar cells: one single junction based on hydrogenated amorphous silicon (a-Si: H) and the other hetero-junction (CdS/CdTe). As a calculation tool, we used the code AMPS-1D, developed by Professor Fonash.

The simulation results, for the amorphous silicon cell showed that, for the active layer, the best value of the thickness of 300nm-600nm. In addition, our simulation results have shown that the best values of the density of states (DOS), which lead to cell output parameters, are between 5.10^{15}cm^{-3} and 10^{16}cm^{-3} . And the gap energy is $E_g(i) = 1.82\text{eV}$. And the efficiency and the efficiency $\eta = 12.655\%$ for a thickness of the absorbent layer $E = 600\text{nm}$.

We then studied the (CdS/CdTe) hetero-junction cell. The simulation, showed that, the best value of the thickness for the absorbent (CdTe) layer is 1000nm and for the tampon (CdS) layer is between 20 and 60nm, and the efficiency is: $\eta = 25.028\%$.

Finally, we conclude that the pin solar cell based on amorphous silicon absorbs the short wavelengths of the visible (400nm to 700nm) while the (CdTe) cell absorbs a wider spectrum which extends to the longest wavelengths of the visible. Wave of red and close to infrared (300nm to 840nm).

المخلص:

يعتمد أداء الخلية الشمسية على خصائص المواد التي تتكون منها و يعتمد عملنا في هذا البحث على محاكاة أداء خليتين شمسييتين من الأغشية الرقيقة: إحداهما بوصلة واحدة تعتمد على السيليكون غير المتبلور المهدرج (a-Si: H) والأخرى مع تقاطعات غير متجانسة (CdS / CdTe) و كأداة حساب ، استخدمنا البرنامج AMPS-1D ، الذي طوره الأستاذ فوناش.

أظهرت نتائج المحاكاة لخلية السيليكون غير المتبلورة أنه للطبقة النشطة أفضل قيمة للسّمك [300 نانومتر - 600 نانومتر] بالإضافة إلى ذلك ، أظهرت نتائج المحاكاة لدينا أن أفضل قيم كثافة الحالات (DOS) ، والتي تؤدي إلى معاملات خرج الخلية ، تتراوح بين 5.10^{15} سم⁻³ و 10^{16} سم⁻³. و فجوة الطاقة هي $E_g(i) = 1.82\text{eV}$ والكفاءة $\eta = 12.655\%$ لسّمك الطبقة الماصة $E=600\text{nm}$.

ثم درسنا الخلية غير المتجانسة (CdS / CdTe). أظهرت المحاكاة أن أفضل قيمة سماكة للطبقة الماصة (CdTe) هي 1000 نانومتر وطبقة التامبون (CdS) تتراوح بين 20 و 60 نانومتر ، والكفاءة هي: $\eta = 25.028\%$.

في النهاية ، نستنتج أن الخلية الشمسية الدبوسية القائمة على السيليكون غير المتبلور تمتص الأطوال الموجية القصيرة للمرئي (400 نانومتر إلى 700 نانومتر) بينما تمتص الخلية (CdTe) طيفاً أوسع يمتد إلى أطوال موجية طويلة. إلى 840 نانومتر).