



Mémoire de fin d'études

Pour l'obtention du diplôme de :

MASTER

Filière : Chimie

Option : Chimie des Matériaux

Par :

Mademoiselle Nour Elhouda BELABAS

Sur le Thème :

Prédiction des propriétés des cellules photovoltaïques à base de nouveaux matériaux semi-conducteurs

Soutenu le : 2020 à Bordj Bou Arréridj devant le jury composé de :

| | | | |
|----------------------|------------|--------------------------|----------------------|
| Mr Mustapha BOUBATRA | MCA | Univ. Bordj Bou Arréridj | Président |
| Mr Abderrazak BOUZID | Professeur | Univ. Bordj Bou Arréridj | Directeur de mémoire |
| Mr Baghdadi MOULA | MCA | Univ. Bordj Bou Arréridj | Examinateur |

Année Universitaire : 2019-2020

Dedications

My beautiful dear parents,

Thank you for all the support and love you have shown me since my childhood and I hope that your blessing always accompanies me. May this modest work be the fulfillment of your formulated wishes, the fruit of your countless sacrifices, and although I can never acquit you enough, all the words of the universe are unable to express my love and affection. Thanks for always being here for me.

My dear sisters and my brothers. As a testimony of my fraternal affection, of my deep tenderness and gratitude, I wish them a life full of happiness and success and may God, the Almighty, protect and keep them.

To all my family for their encouragement, the confidence and the moral support they have shown throughout my university career. I have working with passion, and I am proud to cross the finish of this long process and graduate with honor.

Engulfed in my imaginations too creative and my ambition were too high. The truth is that every word written in the thesis is a relief and pretty attractive, a souvenir that I can keep.

My thoughts infinite, painted a picture I thought I drew it well. I will be waiting on my time cause I'm patient and sympathize. This flourishing thesis means so much to me and I am so happy to share it with the world.

Overflowing with excitement and gratitude. Thank you all for the well wishes.

Nour Elhouda BELABAS

بلعباس نور الهدى

Acknowledgments

First of all, I thank my God **ALLAH**- the Omniscient, the all-Powerful Sage who gave me the strength to complete this present work.

This graduation college application thesis funded by Department of Materials Science, Faculty of Sciences and Technology, applied at Theoretical Chemistry Laboratory. I am truly grateful to have been supervised by the Promotor Abderrazak BOUZID Professor at Bordj Bou Arréridj university. I especially want to express my deep and respectful gratitude for the clarity of his teaching good sciences. He guides my work with great patience during the development of this project.

I Warmly thank for welcoming me into the solar energy society and for having given me the benefit of his experience, his great scientific knowledge, his rigor and his perseverance. He is a passionate scientist with endless ideas that he continuously shared with me and other students allowing us to choose which one to pursue and how to conduct it. I want to say that our interactions were crucial for my success. He is also very interesting character on a personal level, honest and direct about everything.

I always enjoyed the great discussion and I appreciate the precious advice and constant support he gave me throughout my master program. I extend my sincere thanks to him for the confidence to work under the shadow of his permanent support, the kindness he shows. and his knowledge in the field of photovoltaics which he shared with me during long discussions as well as this encouragement to adapt to the new simulations softwares.

I have mentioned some chapters of each genius science that professionally he taught within this thesis, English, Synthesis and Elaboration of Materials, New materials, Choice and Selection of Materials, Research Methods and Averages, Modeling and simulation, Solar cell. I have improved in so many ways regarding my academy training during this period and I am sure that this success experience will be invaluable.

Finally, I cannot forget to thank all the persons who are dear to me, and in particular my father, my mother, my sisters and brothers for their encouragement, the confidence and the moral support they have shown throughout this year of thesis. I would like to thank all the lovely people for spreading the great positive energy and sharing the inspiration thoughts to the success of this special thesis.

List des illustrations

| | |
|--|----|
| Figure 1: La consommation d'énergie par source en 2017 [3] | 1 |
| Figure I.1 : Spectres du rayonnement solaire moyen incident au sommet de l'atmosphère (courbe noir) et à la surface de la terre (bleu) [21]..... | 6 |
| Figure I.2 : Schéma descriptif de l'incidence solaire sur la terre..... | 7 |
| Figure I.3 : Part de marché des différentes technologies solaires [28], [29]. | 9 |
| Figure I.4 : L'évolution des rendements de cellules et modules photovoltaïques obtenus depuis l'origine (NREL) [30]..... | 10 |
| Figure I.5 : Mouvement des porteurs de charges libres dans une cellule solaire à base d'une simple jonction PN. | 11 |
| Figure I.6 : Jonction PN..... | 12 |
| Figure I.7 : Effet PV dans (a) une jonction p-n simple et (b) multi-jonctions [32]..... | 13 |
| Figure I.8 : Principe fonctionnement d'une cellule solaire..... | 14 |
| Figure I.9 : Transition bande a bande dans un conducteur (a) bande interdite directe, (b) bande interdite indirecte..... | 15 |
| Figure I.10 : Diagramme énergétique ; (a) semi-conducteur/métal isolés (b) semi-conducteur/métal en contact à l'équilibre. | 17 |
| Figure I.11 : Diagramme énergétique ; (a) régions p/n isolés (b) régions p/n en contact a l'équilibre. | 18 |
| Figure I.12 : Diagramme énergétique illustrant la formation de l'hétérojonction ; (a) régions p/n isolés (b) régions p/n en contact a l'équilibre..... | 19 |
| Figure I.13: Schéma équivalent d'une cellule solaire dans le cas idéal..... | 20 |
| Figure I.14 : Schéma équivalent d'une cellule solaire dans le cas réel. | 21 |
| Figure I.15 : Caractéristique J(V) d'une cellule solaire dans l'obscurité et sous ensoleillement. | 22 |

| | |
|--|----|
| Figure I.16 : Rendement quantique externe de la cellule solaire et les différents types de perte. [41]. | 24 |
| Figure I.17 : Différents pertes optiques et électriques existant dans une cellule solaire [41]. | 25 |
| Figure I.18 : L'effet de la résistance série sur la caractéristique J-V, simulation SCAPS-1D [41]. | 26 |
| Figure I.19 : Principaux mécanismes de recombinaison dans un semi-conducteur (a) radiative, (b) Auger et (c) SRH. | 27 |
| Figure II.20 : Cellule solaire au CIS en couche mince [48]. | 31 |
| Figure II.21 : Structure en coupe d'une cellule CIGS : (a) schéma, (b) Image au microscope à balayage (MEB) [52]. | 33 |
| Figure II.22 : Comparaison des mailles élémentaires des structures cristallines du Si, du CdTe et du CIGS. Structure chalcopyrite [53]. | 34 |
| Figure II.23 : Coefficient d'absorption des matériaux [60] (CuInSe ₂ , CdTe, GaAs, a-Si : H, mono-Si et CdS). | 36 |
| Figure II. 24 : Principaux types de gradients de bande interdite rencontrés dans les couches de CIGS (a) bandes plates, (b) simple gradient et (c) double gradient avec présence d'un notch. | 38 |
| Figure II.25 : Diagramme de bande d'une structure ZnO/CdS/CIGS présentant les trois principales zones de recombinaisons : (a) dans la zone quasi-neutre (ZQN) du CIGS, (b) dans la zone de charge d'espace (ZCE), (c) à l'interface CdS/CIGS. Les flèches horizontales en pointillés indiquent la possible participation de l'effet tunnel aux recombinaisons. | 39 |
| Figure III.26 : Fenêtre d'exécution « Action panel » de SCAPS. | 44 |
| Figure III.27 : Définition du point de fonctionnement. | 45 |
| Figure III.28 : Choix de l'illumination. | 46 |
| Figure III.29 : Panneau de définition de la structure. | 47 |

| | |
|--|----|
| Figure III.30 : Panneaux de définition des propriétés des couches. | 48 |
| Figure III.31 : Ajouter/supprimer “defects”. | 49 |
| Figure III.32 : Panneaux de définition des propriétés par défaut. | 49 |
| Figure III. 33 : Processus de recombinaison a) radiative, b) Auger et c) SRH..... | 50 |
| Figure III.34 : Modèle de recombinaison. | 51 |
| Figure III.35 : Propriétés du contact..... | 52 |
| Figure III.36 : Stratégie de fonctionnement de SCAPS..... | 53 |
| Figure III.37 : Panneau d’affichage des résultats de bande d’énergie, courant et concentration. | 54 |
| Figure III.38 : Panneau I-V avec visualisation des paramètres de la cellule. | 55 |
| Figure III.39 : Panneau du rendement quantique. | 56 |
| Figure III.40 : Les choix possibles du panneau de rendement quantique QE..... | 56 |
| Figure IV.41 : Structure de la cellule solaire au CIGS ou CZTSSe..... | 58 |
| Figure IV.42 : Techniques de dépôt des couches minces [85]..... | 61 |
| Figure IV.43 : Schéma représentatif d’un empilement d’une cellule solaire à base de CuInSe ₂ | 61 |
| Figure IV. 44 : Simulation des performances de la cellules solaire de CIS en fonction de variation de l’épaisseur de l’absorbeur sur Voc ; Jsc ; FF ; rendement. | 67 |
| Figure IV.45 : Variation des performances de la cellule solaire chalcopyrite en fonction de variation de l’épaisseur de la couche fenêtre ZnO. Voc et Jsc , FF et rendement. | 69 |
| Figure IV.46 : Variation des paramètres de performance de la cellule avec l’épaisseur de la couche buffer CdS : Voc , Jsc , FF et rendement. | 72 |
| Figure IV.47 : Effet de densité du défaut en fonction de variation de l’épaisseur de la couche fenêtre ZnO sur les performances de la cellule en chalcopyrite Voc ; Jsc ; FF ; rendement.... | 74 |

Figure IV.48 : Courbes de simulation du rendement quantique dans les cellules solaires de type CIS en fonction de densité de défaut pour les différentes épaisseurs de la couche ZnO.75

Figure IV.49 : Effet de la densité du défaut en fonction de variation de l'épaisseur de la couche buffer CdS en chalcopyrite sur les paramètres de la cellule **Voc**; **Jsc**; **FF**; rendement.....77

Figure IV.50 : Courbes de simulation du rendement quantique dans les cellules solaires de type CIS en fonction de la densité du défaut pour les différentes épaisseurs de la couche CdS.....78

List des tableaux

| | |
|---|----|
| Tableau I.1 : Evolution des rendements record du photovoltaïque sur 2ans, entre 2015 et 2018 d'après les données de NREL et comparaison entre les différentes filières [8]. | 9 |
| Tableau II.2 : Aperçu du marché des métaux [59]. | 34 |
| Tableaux IV.3 : Principaux paramètre des matériaux utilisé. | 63 |
| Tableau IV.4 : Etat des défauts pour différentes couches de la cellule. | 64 |
| Tableau. IV.5 : Effet de l'épaisseur de la couche absorbeur CIS sur les caractéristiques électriques de la cellule solaire. | 66 |
| Tableau IV.6 : Effet de variations de l'épaisseur de la couche fenêtre ZnO sur les caractéristiques électriques de la cellule PV à base de CIS. | 69 |
| Tableau. IV. 7 : Effet de variation de l'épaisseur de la couche buffer CdS sur les caractéristiques électriques de la cellule solaire à base de CIS. | 71 |
| Tableau. IV. 8 : Effet de défaut et les différentes épaisseurs de la couche fenêtre ZnO sur les caractéristiques électriques de la cellule solaire à base de CIS..... | 73 |
| Tableau. IV.9 : Effet de défaut et les différentes épaisseurs de la couche buffer CdS sur les caractéristiques électriques de la cellule solaire à base de CIS..... | 76 |

List des symboles

μ . Mobilité des porteurs de charges.

t_c . Temps entre deux collisions du porteur avec les atomes du cristal ou des impuretés.

K_B . Constante de BoltZmann.

T . Température absolue en degrés Kelvin.

q . Charge élémentaire.

A . Facteur d'idéalité de la diode.

J_0 . Densité de recombinaison des porteurs.

D_n, D_p . Coefficients de diffusion des porteurs minoritaires dans les matériaux n et p.

L_n, L_p . Longueurs de diffusion des minoritaires dans les régions n et p.

N_A, N_D . Concentrations de dopage dans les régions P et N.

J_{Dark} . Courant sous obscurité.

J_{ph} . Courant photo-généré.

J_{SC} . Densité du courant de court-circuit.

$F(\lambda)$. Densité du flux incident sur une unité de surface par unité de temps.

$R(\lambda)$. Coefficient de réflexion.

IQE. Rendement quantique interne.

V_{OC} . Tension en circuit ouvert.

FF . Facteur de forme.

P_{max} . Puissance maximum délivré par la cellule.

V_{max} . Tension correspondant au maximum de la cellule délivrée par la cellule.

J_{max} . Courant correspondant au maximum de la cellule délivrée par la cellule.

η . Rendement photovoltaïque.

P_{OUT} . Puissance générée par la cellule.

P_{in} . Puissance incidente du rayonnement lumineux éclairant la cellule.

QE . Rendement quantique de la cellule.

ϕ . Photons incidents.

E_{ph} . Energie photon incident.

E_g . Energie de gap.

E_F . Energie de fermi.

SRH . Shockley-Read-Hall.

$\tau_{(SRH,n)} \cdot \tau_{(SRH,p)}$. Durées de vie d'électrons et des trous.

n_i . Concentration intrinsèque.

E_R . Énergie associée aux centres piège.

N_t . Concentration des défauts.

σ_p . σ_n . Sections efficaces de capture par le trou et l'électron.

V_{th} . Vitesse thermique.

E_I . Niveau de Fermi intrinsèque.

U_{SRH} . Porteurs libres.

α . Coefficient d'absorption.

List des abréviations

AM0. Masse d'air nulle.

AM1. Masse d'air arrivant à la surface terrestre.

AM1.5. Masse d'air pour la lumière arrivant à 48.2° sur la surface de la terre.

PV. Photovoltaïque.

ZCE. Zone de charge d'espace.

Si. Silicium.

CIS. Cuivre Indium Sélénium.

CIGS. Cuivre Indium Sélénium Gallium.

CZTS. Sulfure de Cuivre, de Zinc et d'étain.

CdTe. Tellurure de Cadmium.

CdS. Soufre de Cadmium.

ZnO. Oxide de Zinc.

ITO. Indium Tin Oxide.

GaP. Phosphure de Gallium.

InGaAs. Arséniure/indium de gallium.

SCAPS-1D. A One Dimensionnel Solar Cell Capacitance Simulation Program.

Table des matières

| | |
|--|------|
| List des illustrations..... | I |
| List des tableaux..... | V |
| List des symboles | VI |
| List des abréviations | VIII |
| Table des matières | IX |
| Introduction générale..... | 1 |
| Chapitre I : Principe de fonctionnement des cellules solaires | |
| I.1 Introduction..... | 5 |
| I.2 Soleil..... | 5 |
| I.3 Rayonnement solaire | 6 |
| I.4 Cellule solaire photovoltaïque | 8 |
| I.4.1 Historique..... | 8 |
| I.4.2 Description..... | 11 |
| I.5 Jonction PN..... | 11 |
| I.6 Effet photovoltaïque | 12 |
| I.7 Fonctionnement d'une cellule solaire..... | 13 |
| I.7.1 Interaction Rayonnement/Semi-conducteur..... | 14 |
| I.7.2 Génération des porteurs de charges..... | 15 |
| I.7.3 Mobilité et la collecte des porteurs de charge..... | 16 |

| | |
|--|----|
| I.7.4 Caractéristique J-V d'une cellule solaire | 19 |
| I.7.4.1 Sous obscurité | 19 |
| I.7.4.2 Sous Ensoleillement | 20 |
| I.7.5 Paramètres photovoltaïques d'une cellule solaire | 21 |
| I.7.5.1 Densité du courant de court-circuit (J_{sc}) | 22 |
| I.7.5.2 Tension en circuit ouvert V_{oc} | 22 |
| I.7.5.3 Facteur de forme (FF) | 23 |
| I.7.5.4 Rendement photovoltaïque (η) | 23 |
| I.7.5.5 Rendement quantique de la cellule QE | 23 |
| I.7.6 Les différents types de perte dans une cellules solaires | 24 |
| I.7.6.1 Pertes extrinsèques | 24 |
| I.7.6.2 Pertes intrinsèques | 24 |
| I.7.7 Résistances parasites | 25 |
| I.7.7.1 Résistance série | 25 |
| I.7.7.2 Résistance shunt | 26 |
| I.7.8 Recombinaison | 27 |
| I.7.8.1 Recombinaison radiative | 27 |
| I.7.8.2 Recombinaison indirecte (assistée par piège) | 27 |
| I.7.8.3 Recombinaison Auger | 28 |
| I.8 Avantages et Inconvénients de l'énergie photovoltaïque | 29 |

| | |
|---------------------------|----|
| I.8.1 Avantages..... | 29 |
| I.8.2 Inconvénients | 29 |
| I.9 Conclusion | 29 |

Chapitre II : Description des matériaux pour le photovoltaïque

| | |
|--|----|
| II.1 Introduction | 30 |
| II.2 Les cellules photovoltaïques couches mince à base de Chalcopyrite | 30 |
| II.2.1 Le di-séléniure de cuivre et indium (CIS ou CIGS)..... | 30 |
| II.2.2 Architecture des cellules CIGS | 32 |
| II.2.3 Structure du matériau CIGS..... | 33 |
| II.2.4 Propriétés optiques | 35 |
| II.3 Avantages et Inconvénients du matériau CIGS | 39 |
| II.3.1 Avantages | 39 |
| II.3.2 Inconvénients | 39 |
| II.4 Conclusion | 40 |

Chapitre III : Modalisation et simulation

| | |
|---|----|
| III.1 Introduction | 41 |
| III.2 Techniques de modélisation | 41 |
| III.3 Logiciels de simulations les plus utilisées | 42 |
| III.4 SCAPS | 42 |
| III.5 Utilisation du SCAPS | 43 |

| | |
|--|----|
| III.5.1 Fenêtre d'exécution (Action Panel) | 43 |
| III.5.1.1 Définir le point de fonctionnement | 45 |
| III.5.2 Fenêtre de conception du dispositif (Set Problem) | 46 |
| III.5.2.1 Défaut (Defects)..... | 48 |
| III.5.2.2 Mécanisme de recombinaison | 49 |
| III.5.2.3 Absorption | 51 |
| III.5.2.4 Propriété de contact..... | 51 |
| III.5.2.5 Théorie de fonctionnement | 53 |
| III.5.3 Fenêtre de résultat | 54 |
| III.5.3.1 Panneau I-V (I-V panel) | 54 |
| III.5.3.2 Panneau QE (QE-panel) | 55 |
| III.6 Avantages et inconvénients du SCAPS | 56 |
| III.7 Conclusion..... | 57 |
| Chapitre IV : Application | |
| IV.1 Introduction..... | 58 |
| IV.2 Amélioration de la performance des cellules solaires chalcopyrites..... | 59 |
| IV.2.1 Choix et sélections des matériaux | 59 |
| IV.2.2 Synthèse et élaboration des matériaux | 60 |
| IV.3 Description des cellules solaires à base chalcopyrites..... | 61 |
| IV.4 Etude numérique des paramètres de la cellule solaire chalcopyrite | 62 |

| | |
|---|----|
| IV.5 Etude théorique et prédictive sur les performances des Chalcopyrites | 64 |
| IV.5.1. Effet de l'épaisseur de couche absorbeur sur les performances des Chalcopyrites | 65 |
| IV.5.2 Effet de l'épaisseur de la couche fenêtre ZnO sur les performances des Chalcopyrites | 68 |
| IV.5.3 Effet de l'épaisseur de la couche buffer CdS sur les performances des Chalcopyrites | 70 |
| IV.5.4 Influence de la densité de défaut sur les performances des Chalcopyrites | 73 |
| IV.5.4.1 Influence de densité de défauts de couche fenêtre ZnO en fonction de variation de l'épaisseur | 73 |
| IV.5.4.1.1 Effet de densité du défaut en fonction de différentes épaisseurs de la couche fenêtre ZnO sur le rendement quantique externe de cellule solaire chalcopyrite | 75 |
| IV.5.4.2 Influence de densité du défaut de la couche buffer CdS en fonction de variation de l'épaisseur | 76 |
| IV.5.4.2.1 Effet de la densité du défaut en fonction de différentes épaisseurs de la couche buffer CdS sur le rendement quantique externe de la cellule solaire chalcopyrite..... | 77 |
| IV.6 Conclusion | 78 |
| Conclusion générale | 80 |
| Anthology | 81 |
| Bibliography..... | 89 |

Introduction générale

L'augmentation de la consommation mondiale en énergie, les ressources limitées des énergies fossiles telles que le charbon, le gaz et le pétrole, ainsi que l'opposition croissante à la production d'énergie nucléaire, motivées par des préoccupations relatives à la sécurité et à l'élimination des déchets radioactifs, ont entraîné une demande croissante de production d'énergie propre et renouvelable pour répondre aux futurs besoins énergétiques du monde [1]. Selon le dernier rapport de REN21 (Réseau de politiques sur les énergies renouvelables pour le XXIe siècle - 2017), les ressources renouvelables ont représenté environ 15% du total de la consommation énergétique mondiale et de la production d'électricité [2].

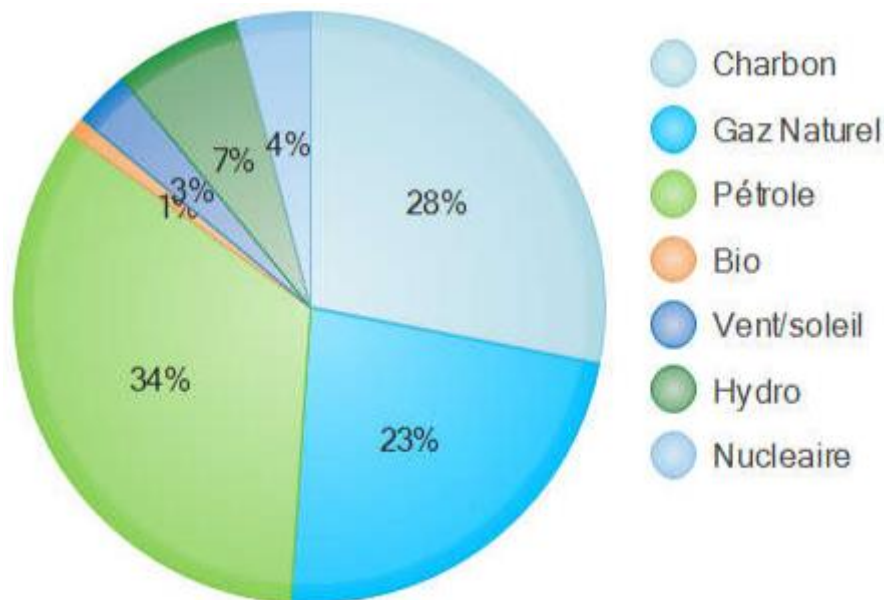


Figure 1 : La consommation d'énergie par source en 2017 [3].

Ces ressources d'énergie renouvelables constituent un groupe de sources d'énergie alternatives comprenant l'énergie du soleil, le vent, et le mouvement de l'eau dont les stocks sont illimités. Les technologies photovoltaïques (PV) sont des outils d'énergie renouvelables prometteuses et sont considérées comme un futur substitut viable pour les systèmes de production d'électricité utilisant des combustibles fossiles. Cette source d'énergie par la passe a été déjà exploitée depuis de nombreuses années [4] dans le domaine des satellites, des vaisseaux spatiaux [5] et puis pour des applications terrestres [6].

La croissance démographique, particulièrement importante dans les zones non reliées au réseau électrique est un autre facteur qui induit le développement de l'industrie photovoltaïque. L'intérêt suscité par les cellules solaires en tant que source d'énergie alternative pour les

applications terrestres est également motivé par les préoccupations sociales motivées par l'amélioration du niveau de vie moderne, ainsi que par la forte volonté humaine de réaliser des économies. Il est également nécessaire de protéger notre santé et notre environnement. Celles-ci peuvent être réalisées grâce à l'utilisation d'énergie produite à partir d'une technologie photovoltaïque respectueuse de l'environnement, au lieu des combustibles fossiles, qui produisent des gaz à effet de serre nocifs pour l'environnement [7]. Pour faire face à ce défi, les chercheurs déploient des efforts considérables pour accroître la production d'énergie grâce à diverses sources d'énergie renouvelables, sans présenter de risques pour l'environnement ni appauvrir les ressources naturelles [8].

Les panneaux solaires photovoltaïques ont reçu une attention considérable de la part de la communauté scientifique et se sont rapidement développés au cours des dernières décennies parmi d'autres sources d'énergie renouvelables. Bien que la contribution de l'énergie solaire à la consommation totale d'énergie totale actuelle soit très inférieure, entre 2 et 3%, les développements récents et les progrès de la technologie photovoltaïque solaire laissent fortement présager de relever les défis énergétiques mondiaux [9]. L'augmentation du volume de production et les nouvelles technologies de cellules solaires rentables ont rendu cette réalisation possible. Il existe actuellement un certain nombre d'options prometteuses pour les développements futurs de la technologie photovoltaïque. La commercialisation de ces technologies a été entravée par le coût élevé des modules de cellules solaires. Même si les chercheurs ont déployé des efforts au fil des années pour améliorer les performances, réduire les coûts et améliorer la fiabilité des systèmes photovoltaïques qui restent une préoccupation majeure [4]. La nécessité de développer des technologies efficaces, en particulier des technologies à couches minces, qui sont encore moins chères et rentables et englobent également des matériaux peu coûteux [8].

Les technologies à base de silicium cristallin dominent actuellement le marché du photovoltaïque, grâce à leurs faibles coûts de fabrication et à la grande fiabilité de leurs matériaux et de leurs processus de fabrication [10]. Les efficacités typiques des modules sont d'environ 17 à 18%, avec une efficacité record du produit commercial de 22,2% [11]. Le dernier record certifié de Kaneka étant de 26,6% [12].

Les dernières années ont été marquées par une augmentation de la recherche et de l'activité commerciale dans les systèmes photovoltaïques à base de matériaux autres que le silicium, motivés à l'origine par la possibilité de fournir des technologies photovoltaïques

fondamentalement moins coûteuses que le silicium. Toute technologie susceptible de réduire les coûts des cellules solaires à base de silicium prédominerait rapidement à l'échelle mondiale. Cependant, à mesure que les coûts des cellules solaires à base de silicium diminuent, il devient de plus en plus difficile de surpasser leur rapport puissance / coût [13], [14]. Les seules technologies restantes sont les chalcopyrites CIS et sa variante CIGS qui sont des matériaux imprimables et permettent de fournir un rendement élevé en laboratoire d'environ 20% pour des surfaces inférieures à 1 cm².

Le diséléniure de cuivre et d'indium (CIS) c'est un matériau très intéressant [15], de structure chalcopyrite, possède un rendement théorique d'environ 25% pour l'hétérojonction (n)CdS-(p)CuInSe₂. Les travaux sur les cellules solaires à base de CIS portent aujourd'hui sur des alliages quaternaires Cu(InGa) Se₂ (CIGS) de façon à élargir sensiblement la bande interdite [16] Récemment, les technologies de cellules photovoltaïques à couche mince CIGS, qui servent de couche absorbante, ont atteint un rendement solaire record de 22,6%, établissant un nouveau record mondial pour les dispositifs à couche mince [17] et dépassant de 1,3% les performances des cellules en silicium polycristallin [18]. L'inconvénient majeure de l'utilisation de CIGS est le coût élevé des constituants que sont l'indium et du gallium car ces matériaux étant rares. Cela a affecté l'utilisation des cellules solaires à couche mince. Afin de remédier et pallier ce problème de manque, il est intéressant de réduire l'épaisseur de la couche d'absorbeur, entraînant ainsi une réduction de l'utilisation d'indium et de gallium pour le CIS et CIGS, par exemple. Il est nécessaire de proposer une nouvelle couche d'absorbeur qui peut associer le CIS ou CIGS avec CdS formant une structure très mince.

La simulation est la représentation imitative du fonctionnement d'un système ou d'un processus sans expérimentation. En raison du coût élevé de l'expérience, cet outil est devenu primordial pour le développement des recherches notamment en photovoltaïque, gagnant du temps et de l'argent [19]. Ces outils permettent aux ingénieurs et aux scientifiques de concevoir et de comprendre des dispositifs de nanostructure de plus en plus sophistiqués. La grande variété de matériaux, de dispositifs, de mécanismes physiques et d'approches de modélisation rend souvent difficile la sélection de modèles théoriques ou de logiciels appropriés [8].

La question qui se pose, qu'est ce qui doit être fait pour que la technologie CIS et sa combinaison CIGS atteigne une grande échelle de production d'électricité photovoltaïque ? L'objectif dans ce projet est de développer une méthode efficace afin d'améliorer le rendement et la performance de la cellule solaire à base chalcopyrites. Nous intéressons de proposer une

nouvelle structure alternative composée d'une couche de CdS avec une autre couche mince de l'absorbeur de semiconducteur comme le CIS ou CIGS. En utilisons dans notre travail comme un principal nouveau programme de simulation numérique unidimensionnel le simulateur SCAPS-1D

Ce manuscrit s'articule autour de quatre chapitres. Le premier chapitre offre une définition sur le soleil et rayonnement solaire et ces caractéristiques, nous aborderons le principe de fonctionnement de ces cellules solaire. Nous intéresserons tout d'abord à décrire la théorie fondamentale de la jonction p-n et l'effet photovoltaïques ainsi que fonctionnement de la cellule solaire. Nous verrons ensuite les différents paramètres et caractéristiques des cellules.

Le deuxième chapitre est centré sur la description de l'ensemble des matériaux photovoltaïques étudié dans ce travail tels que les chalcopyrites, nous motterons en évidence leur architecture, structure cristallographique ainsi que leurs propriétés géométrique, physiques, électrique et optoélectroniques.

Le troisième chapitre présente un outil de simulation informatique joue un rôle essentiel dans la conception, le développement et l'optimisation de dispositifs électroniques et physiques que nous avons utilisé pour étudier les performances des cellules photovoltaïques. Nous présenterons en détails le principe de fonctionnement du programme SCAPS utilisé dans nos simulations.

En fin, le dernier chapitre sera consacré à présenter nos résultats originaux obtenus d'une année de méthodes et moyenne de recherche car le choix et sélectionné du matériau est une étape très importante et qui doit être étudiée avant de commencer de travailler sur n'importe quelle structure, nous choisissons type nouveaux matériaux rares chalcopyrites. Nous présenterons une étude approfondie ainsi nos simulations pour analyser les performances des cellules solaires de la nouvelle cellule très mince basée sur la structure de CIS(p)/CdS(n). Dans un premier lieu, nous étudierons les effets majeurs qui influent sur les performances de la cellule solaire tels que la variation de l'épaisseur de la couche d'absorbeur et les autre couches composants la cellule solaire chalcopyrites. Dans un second lieu, nous additionnons l'hypothèse des défauts qui limitent les performances des cellules basées sur CIS. Le champ de recherche et d'investigation approfondi sur ces matériaux prometteurs reste relativement vierge. Nous espérons bien sûr que nos nouveaux matériaux seront des supers options pour le développement de la communauté photovoltaïque intelligent en couche mince du futur.

Chapitre I : Principe de fonctionnement des cellules solaires

I.1 Introduction

La révolution des énergies renouvelables est avancée comme un dénouement à tous nos problèmes de production d'énergie électrique. Mais il serait plus raisonnable de voir ces nouvelles solutions techniques comme un simple frein au réchauffement climatique à condition que notre consommation énergétique ne continue pas d'augmenter exponentiellement. Cela éviterait ainsi de reproduire les mêmes erreurs du passé en pensant à des solutions "miracles" qui seraient inépuisables et sans impact sur notre mode vie ou sur l'environnement. L'énergie solaire offre une voie fiable, propre et adaptable suivant les besoins pour générer chaleur et électricité. Plus particulièrement, le photovoltaïque constitue une solution pour pallier le problème d'approvisionnement en énergie des pays en développement. Le coût et les performances des panneaux photovoltaïque dépendent fortement de la loi de commande avec laquelle on peut assurer une bonne extraction de la puissance maximale et cela quelque soit les conditions météorologiques.

I.2 Soleil

Le soleil est considéré comme étant le cœur de notre système solaire. Il est à l'origine de la majeure partie de l'énergie qui maintient la vie sur terre et produit l'attraction gravitationnelle nécessaire pour maintenir notre planète sur une orbite presque circulaire. La connexion et les interactions entre le soleil et la terre déterminent les saisons, les courants océaniques, la météo, le climat, les ceintures de radiation et les aurores. La distance entre la terre et soleil, R , est d'environ 1.5×10^{11} m. Le soleil est supposé sphérique et que le spectre du rayonnement solaire du soleil est proche de celui d'un corps noir [20]. Dont la température de surface est d'environ 6000 K. Cette température de surface est maintenue par l'énergie générée par fusion nucléaire continue de l'hydrogène en hélium à l'intérieur. La température intérieure est d'environ 10^7 K. En raison de la température intérieure, la surface (photosphère) émet des ondes électromagnétiques dans toutes les directions. Même si le ciel est dégagé, l'intensité lumineuse est atténuée d'au moins 30% en raison de la diffusion par les molécules, des aérosols et des particules de poussière et de l'adsorption par ses gaz constitutifs tels que la vapeur d'eau, l'ozone ou le dioxyde de carbone [8].

I.3 Rayonnement solaire

Le soleil libère continuellement une énorme quantité d'énergie rayonnante dans le système solaire, cette dernière est constituée d'ondes électromagnétiques dont une partie atteint constamment la limite supérieure de l'atmosphère terrestre. En raison de la température superficielle du soleil (environ 6000 K), ce rayonnement électromagnétique se situe dans la gamme de longueur d'onde de la lumière visible dont la longueur d'onde s'étend de l'ultraviolet (0.2 μm) à l'infrarouge lointain (2.5 μm). En moyenne, 1367 watts atteignent chaque mètre carré de la couche atmosphérique externe. L'intensité et la distribution spectrale qui arrivent à la surface de la terre sont considérablement modifiées en raison de la diffusion et de l'absorption atmosphérique. Les puissances rayonnantes par unité dépendent fortement de la longueur du trajet des rayons du soleil dans l'atmosphère de la Terre. Le terme intensité de la masse d'air (AM) est souvent utilisé pour désigner le rapport du chemin optique au chemin normal au niveau de la mer par jour sans nuages [20]. En effet, en traversant les différentes couches de l'atmosphère, une partie de l'énergie solaire s'atténue (elle subit l'influence de la couche atmosphérique traversée, tant pour son intensité que pour sa composition spectrale (raies d'absorption O_3 , O_2 dans la région UV, et H_2O , CO_2 , N_2O , CH_4 dans la région IR), (Figure I.1). Pourtant, la quantité d'énergie solaire qui atteint la surface de la terre en une heure représente 8000 à 10000 fois la quantité totale d'énergies consommée par la population mondiale en une année [8].

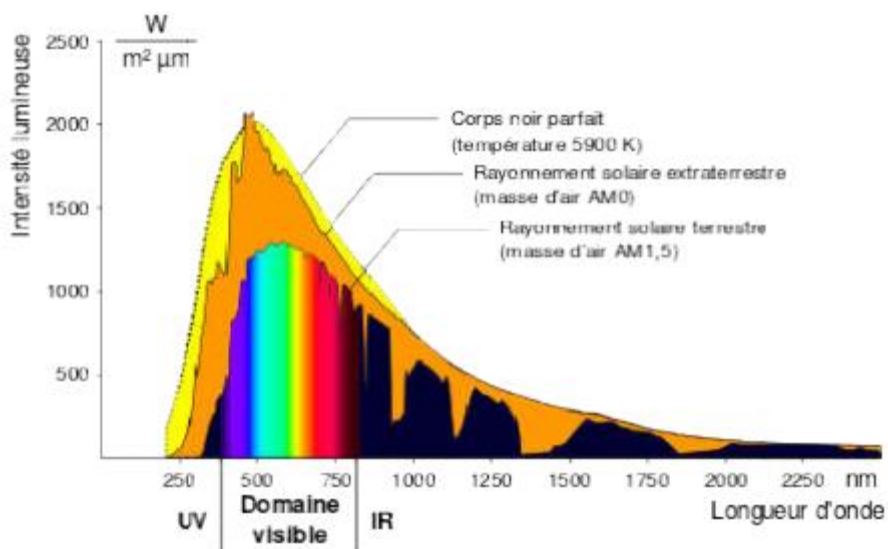


Figure I.1 : Spectres du rayonnement solaire moyen incident au sommet de l'atmosphère (courbe noire) et à la surface de la terre (bleu) [21].

Pour tenir compte de la longueur effective parcourue à travers l'atmosphère terrestre traversée par le rayonnement solaire direct, on introduit la notion de masse d'air (AM x) (Figure I.2) Elle correspond à la perte de l'énergie solaire par l'absorption atmosphérique. La masse d'air est exprimée comme un multiple du parcours traversé en un point au niveau de la mer, le soleil étant au zénith [20].

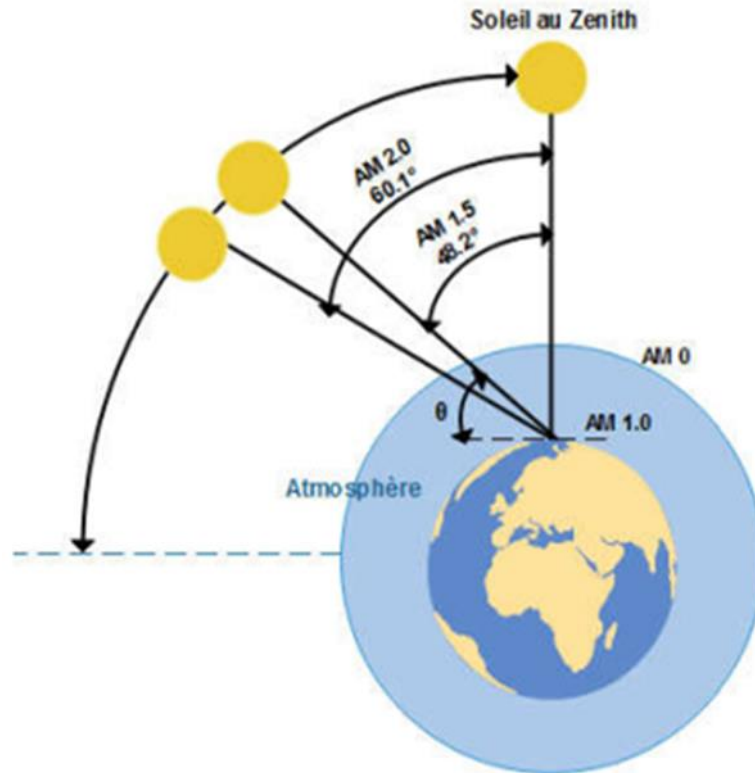


Figure I.2 : Schéma descriptif de l'incidence solaire sur la terre.

En chaque point, la valeur de la masse d'air est donnée par l'équation I-1 :

$$AM \approx \frac{1}{\sin \theta} \quad (I.1)$$

Où l'angle θ est l'élévation solaire, l'angle exprime en radian, entre le rayonnement solaire et le plan horizontal. Le spectre solaire AM0 est la distribution spectrale et l'intensité de la lumière solaire en dehors de l'atmosphère terrestre, Pour un ciel clair, le soleil sera au Zénith. On obtient un rayonnement de la masse d'air "1" (ou AM1). Le rayonnement solaire arrivant sur la terre avec une inclinaison d'un angle de 48° est de 1000 W/m^2 (soit 100 mW/cm^2) avec une masse d'air AM 1.5 [22], [23]. De la Figure I.1, on peut déduire que l'éclairement est maximal entre 450 et 700 nm, Le spectre solaire AM 1.5 se compose de 3 à 4 % de lumière ultraviolette ($\lambda < 390 \text{ nm}$), de 45 % de lumière visible ($390 < \lambda < 750 \text{ nm}$), de 52 % de lumière infrarouge qui se

devise en deux sous-gammes (IR Proche ($750 < \lambda < 1400$ nm) = 38 %) et (IR Lointain ($\lambda > 1400$ nm) = 14%) [24].

Parmi les facteurs majeurs qui sont impliqués dans une conversion photovoltaïque efficace, on peut citer l'absorption de la lumière blanche reçue sur terre. En effet, pour une bonne optimisation des performances des dispositifs photovoltaïques, le matériau choisi doit posséder un spectre d'absorption qui correspond au mieux au spectre d'émission du soleil. Pour avoir une grande capacité à absorber le maximum de photon sur une faible épaisseur afin d'éviter ou minimiser les phénomènes de recombinaison déroulant dans les différentes couches de la cellule solaires. Les caractéristiques photovoltaïques (PV) délivrées pour les cellules sont obtenues à partir de leur illumination sous AM 1.5 [8].

I.4 Cellule solaire photovoltaïque

I.4.1 Historique

L'effet photovoltaïque, qui signifie la capacité d'un matériau à convertir l'énergie contenue dans le rayonnement solaire en une énergie électrique, ce phénomène a été découvert en 1839 par le physicien Alexandre Edmond Becquerel. Il observa qu'une différence de potentiel apparaissait entre deux électrodes plongées dans un électrolyte liquide lorsque le dispositif est sous éclairage. Le premier dispositif photovoltaïque a vu le jour en 1883 avec l'apparition de la première cellule solaire à base de sélénium, développée par Adam et Day [25]. Ce phénomène n'a été assimilé qu'en 1905 quand Planck et Einstein ont présenté la définition du photon et l'effet photovoltaïque. Il a fallu attendre 1954 pour que D. M. Chapin, C.S. Fuller et G. L. annoncent la mise au point de la première cellule au silicium dont le rendement a atteint 6 % [26], marquant ainsi véritablement la naissance de l'électricité photovoltaïque. Les premières applications ont lieu dès 1958 avec l'équipement de satellites spatiaux avec la mise au point d'une cellule avec un rendement de 9 %. Mais il faut attendre les années 70 pour que les gouvernements et les industries investissent dans la technologie photovoltaïque afin d'accentuer les efforts de réduction des coûts de production pour permettre les applications terrestres [8].

Le développement de la technologie des cellules solaires a pour but de produire une cellule solaire peu coûteuse, à haut rendement, stable et longue durée de vie, pour mieux remplacer la production d'énergie à partir de combustible fossile. Des recherches sont en cours pour atteindre les objectifs ultimes de la technologie photovoltaïque, qui ont conduit à la découverte de

nouveaux matériaux et de nouvelle technique de fabrication de cellules solaires. Dans le domaine de l'énergie solaire, il existe différentes filières technologies (Figure I.3). [27].

Tableau I.1 : Evolution des rendements record du photovoltaïque sur 2ans, entre 2015 et 2018 d'après les données de NREL et comparaison entre les différentes filières [8].

| Type de cellule | Rendement (%) 2015 | Rendement (%)2018 |
|--------------------------------------|--------------------|-------------------|
| Silicium monocristallin | 25.3 | 25.6 |
| Silicium polycristallin | 20.8 | 21.9 |
| Couche mince Silicium | 13.6 | 21.2 |
| Tellurure de cadmium CdTe | 21.5 | 22.1 |
| Déséléniure de cuivre et indium CIGS | 21.7 | 22.6 |
| Organiques | 11.5 | 11.5 |
| Pérovskite hybride | 20.1 | 22.1 |

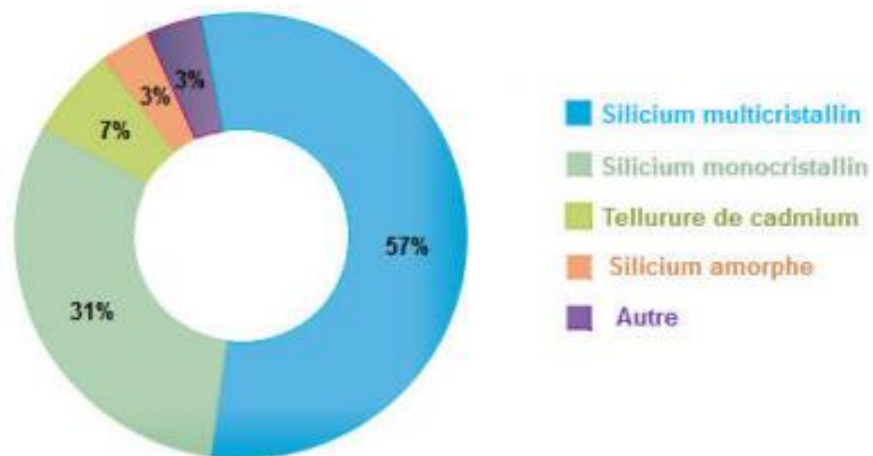


Figure I.3 : Part de marché des différentes technologies solaires [28], [29].

I.4.2 Description

L'énergie solaire apporte une solution alternative aux énergies conventionnelles. Elle est considérée comme étant une énergie à faible coût, propre et respectueuse de l'environnement. Une cellule solaire est un dispositif photovoltaïque destiné à convertir l'énergie solaire (la lumière du soleil) en une énergie électrique, pour la fournir dans une charge adaptée de manière efficace [31]. La paire électron-trou photo-générée dans la couche de l'absorbeur est séparée par le gradient du champ électrique crée par la jonction PN avant qu'elle ne se recombine. Il est important que les semi-conducteurs choisis dans l'application photovoltaïques possèdent de propriétés électriques adéquates telles qu'une mobilité élevée, une longueur de diffusion importante et un coefficient d'absorption très élevé [8]. La figure I.5 présente le mouvement des porteurs de charges libres dans une cellule solaire à base d'une simple jonction PN.

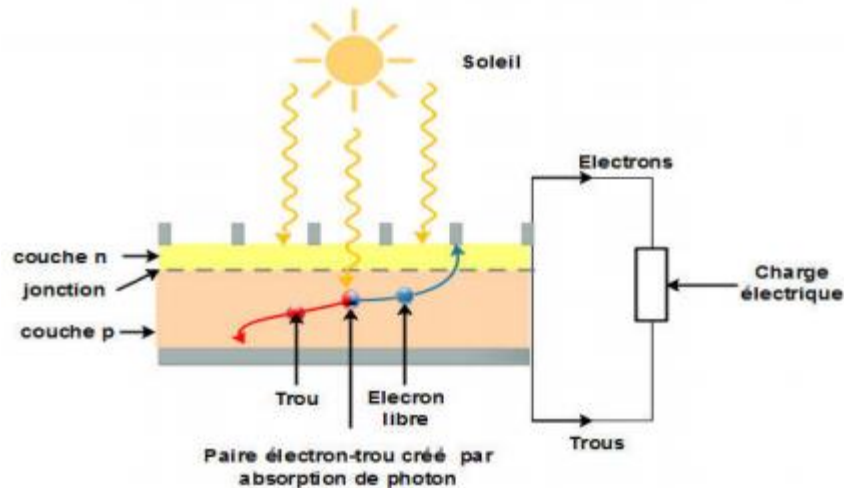


Figure I.5 : Mouvement des porteurs de charges libres dans une cellule solaire à base d'une simple jonction PN.

I.5 Jonction PN

La jonction PN est réalisée quand deux semi-conducteurs de type n et de type p sont juxtaposés, les électrons et les trous majoritaires vont diffuser d'un semi-conducteur à l'autre (phénomène de diffusion) et ils se recombineront créant une zone sans porteur mobile (atomes ionisés) appelée zone de charge d'espace (ZCE) ou zone de déplétion. La recombinaison d'une paire électron-trou va engendrer un déséquilibre dans la neutralité des charges, puisque les concentrations des ions (N_A^- et N_D^+) dans les deux régions proches de la jonction deviennent plus imposantes que les concentrations des porteurs libres (n et p). Ainsi, une charge positive fixe

va apparaître proche de l'interface du côté du semi-conducteur de type n, et une charge négative fixe du côté du semi-conducteur de type p. Un champs électrique induit par ces charges fixes arrête la diffusion des porteurs libres majoritaires et entraine une stabilité et un alignement du niveau de Fermi E_F ce qui induit une courbure des bandes ainsi qu'une barrière de potentiel V_D , la ZCE dépend de la concentration des dopants. Il en est de même pour le champ électrique et le potentiel induit. [8]. La Figure I.6 montre une jonction p-n avec les charges fixes et le champ électrique induit et la largeur de la zone de charges d'espace (ZCE).

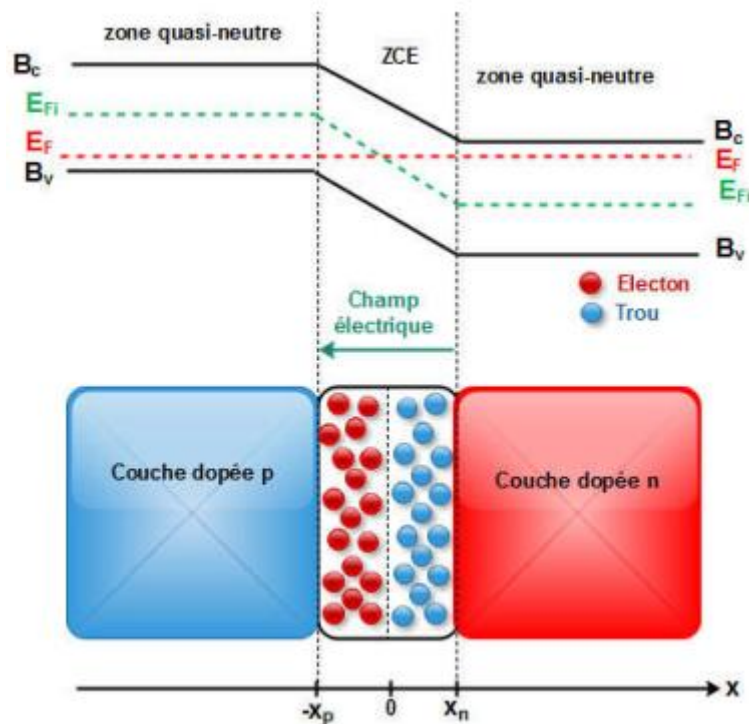


Figure I.6 : Jonction PN.

I.6 Effet photovoltaïque

Dans le cas des semi-conducteurs soumis à un éclairement (flux de photons), quand un photon arrive sur un matériau, deux possibilités s'obtiennent : s'il a une énergie plus faible comparant à celle du gap (E_g), dans ce cas le matériau est transparent pour ce photon, mais s'il a une énergie équivalente ou supérieure à celle du gap (E_g), il sera absorbé pour créer une paire électron-trou. Si l'on arrive à séparer cette paire électron-trou et collecter les porteurs de charges avant leur recombinaison, un courant électrique sera obtenu. En général, la séparation d'une paire électron-trou est réalisée grâce à une jonction p-n qui élabore un champ électrique séparant les porteurs de charge libres. La Figure I.7 (a) montre l'effet photovoltaïque dans les semi-

conducteurs. Les photons possédant une énergie très élevée par rapport à l'énergie interdite (E_g) donnent lieu à un excès d'énergie pour les électrons. Cette énergie excédante sera perdue sous forme de chaleur, ce phénomène est appelé la thermalisation. Ce qui réalise une conversion partielle de l'énergie transportée par le photon en énergie électrique. Pour cette raison, un concept d'empiler plusieurs jonctions p-n avec différents E_g (multi jonctions) peut réduire cette problématique et convertir le maximum d'énergie optique en énergie électrique comme illustré sur la Figure I.7 (b) [8].

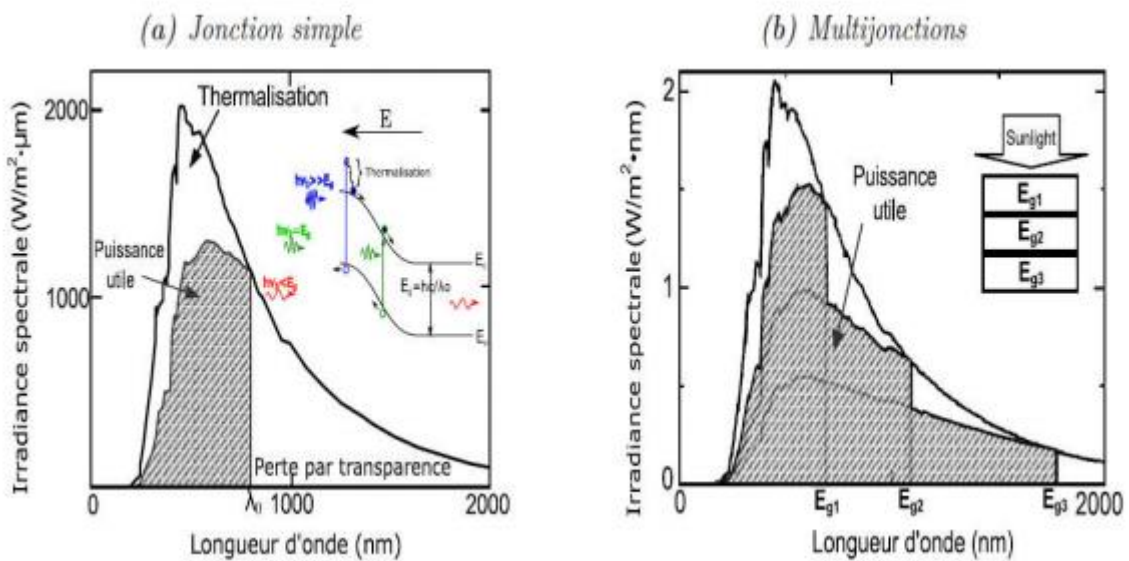


Figure I.7 : Effet PV dans (a) une jonction p-n simple et (b) multi-jonctions [32].

I.7 Fonctionnement d'une cellule solaire

Le principe de fonctionnement de la cellule solaire est illustré sur la Figure I.8. Les photons incidents créent de porteurs libres dans chacune des régions (1), (2) et (3) dont le comportement diffère suivant le lieu de leur création [8].

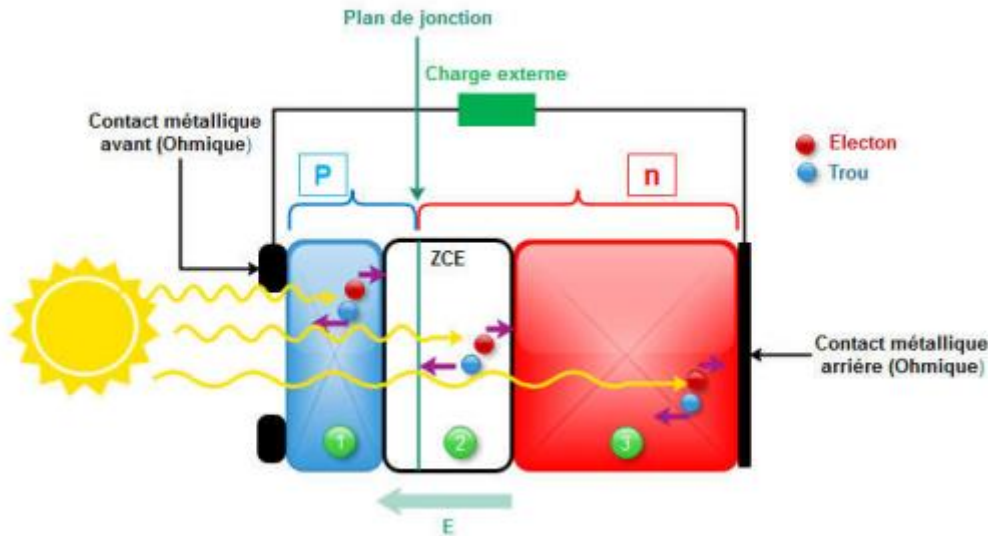


Figure I.8 : Principe fonctionnement d'une cellule solaire.

I.7.1 Interaction Rayonnement / Semi-conducteur

Pour tous les semi-conducteurs inorganiques, l'indice de réfraction (n) se situe entre 3 et 4, par conséquent environ 30 % du rayonnement incident est réfléchi. Les trois processus qui peuvent se produire lors de l'interaction rayonnement/semi-conducteur sont :

- L'absorption fondamentale qui décrit le saut 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 instantanée qui représente le retour d'un électron de la bande de conduction à la bande de valence en libérant un photon,
- L'émission stimulée qui représente le passage d'un électron de la bande de conduction à la bande de valence suite à l'absorption d'un photon avec l'émission d'un deuxième photon.

Ces différents mécanismes sont relatifs au type de semi-conducteur. Nous devons distinguer les semi-conducteurs à bande interdite directe et ceux à bande interdite indirecte. Un semi-conducteur est à bande interdite directe quand le minimum de la bande de conduction (les électrons) et le maximum de la bande de valence (les trous) sont obtenus pour une même valeur du vecteur d'onde k (voir la figure I.9(a)). Ces transitions électroniques bande à bande (de la bande de conduction vers la bande de valence) sont radiatives (émission spontanée) et associées à deux particules : électron-photon, et sont favorisées avec ce type de semi-conducteur utilisé en optoélectronique (matériau III-V en général comme le GaAs, CdTe..). 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 vecteurs d'onde k . Les transitions bande à bande impliquent un changement de vecteur d'onde k et sont donc non-radiatives (voir figure I.9(b)). Dans ce cas une troisième particularité entre en jeu. Elle est associée aux vibrations du réseau cristallin et est distinguée sous le terme de « phonon » d'énergie Ω . Ceci est le cas même si avec un photon de plus grande énergie, un électron peut être directement excité vers un minimum relatif de la bande de conduction et se thermalise dans le minimum absolu de la bande de conduction. Cette structure de bande indirecte s'applique à des matériaux comme le silicium, germanium, le GaP, etc... [8]

Les phénomènes décrits auparavant, implique que l'absorption optique dans les semi-conducteurs à gap direct est considérablement plus élevée que dans les semi-conducteurs à gap indirect. En revanche, la durée de vie des porteurs de charge y est plus faible, car elle ne dépasse pas 10^{-8} s, tant que dans les semi-conducteurs à gap indirect, la durée de vie des porteurs libres sera 1000 fois plus grande [33].

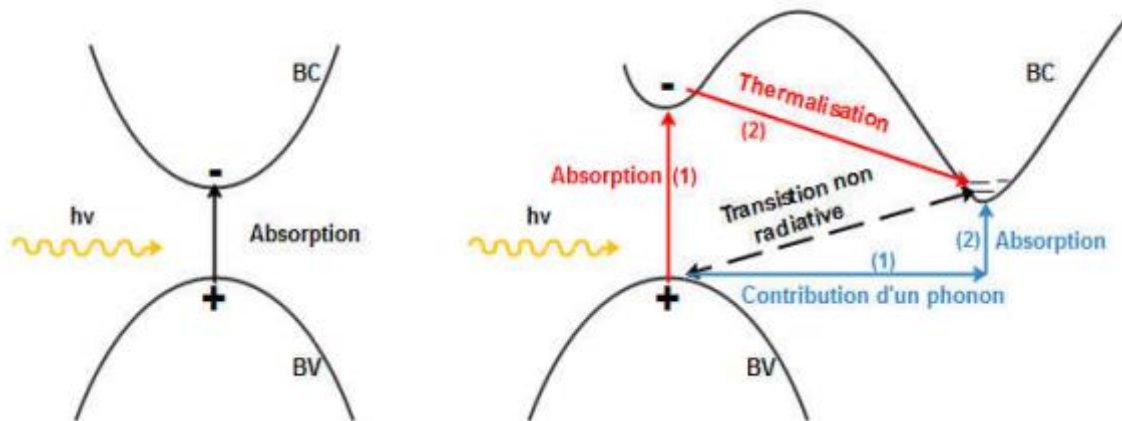


Figure I.9 : Transition bande à bande dans un conducteur (a) bande interdite directe, (b) bande interdite indirecte.

I.7.2 Génération des porteurs de charges

Lorsqu'un photon d'énergie supérieure à E_g (pour les semi-conducteurs ayant un gap direct) ou à $E_g + \Omega$ (pour les semi-conducteurs ayant un gap indirect), est absorbé par le semi-conducteur, une paire électron-trou est créée. Les charges électriques (électron et trou) restent liées par une force coulombienne et forment un ensemble appelé « exciton ». Pour générer un courant électrique, les excitons doivent se dissocier en électrons et trous libres avant que ces deux éléments ne se recombinent. Il existe principalement deux types de recombinaison. Le premier

est dû à un processus physique d'émission spontanée (recombinaison radiative) [34]. Le deuxième mécanisme est celui qui résulte de la recombinaison par pièges qui peuvent être des impuretés et des défauts présents dans le matériau. Ces impuretés introduisent des niveaux d'énergie dans la bande interdite et créent ainsi des centres de recombinaison [8].

I.7.3 Mobilité et la collecte des porteurs de charge

Lorsque les paires électrons-trous se sont dissociées, les charges libres doivent diffuser jusqu'aux électrodes pour être collectées. La mobilité des porteurs de charges définit l'aptitude de ces électrons ou de ces trous à se déplacer à l'intérieur d'un matériau. Elle s'exprime en $cm^2V^{-1}s^{-1}$. Son expression générale est donnée par la relation :

$$\mu = \left| \frac{qt_c}{2m} \right| \quad (I.2)$$

Avec t_c Le temps entre deux collisions du porteur avec les atomes du cristal ou des impuretés, m : la masse effective du porteur de charge (électron ou trou).

Le dispositif de collecte exige un champ électrique élevé pour séparer les paires électron-trou. Il peut être créé en juxtaposant le semi-conducteur en contact intime avec un métal (barrière Schottky) ou avec un autre semi-conducteur. Dans ce dernier cas, les semi-conducteurs peuvent être de même matériau mais dopés différemment (homo-jonction) ou de matériaux différents (hétérojonction) [8].

• Barrière Schottky

Le contact Schottky est typiquement conçu entre un semi-conducteur de type P et un métal ayant un faible travail de sortie (Aluminium, Molybdène...) ou un semi-conducteur de type N et un métal ayant au contraire un grand travail de sortie. Ce dernier cas est représenté par le diagramme énergétique suivant :

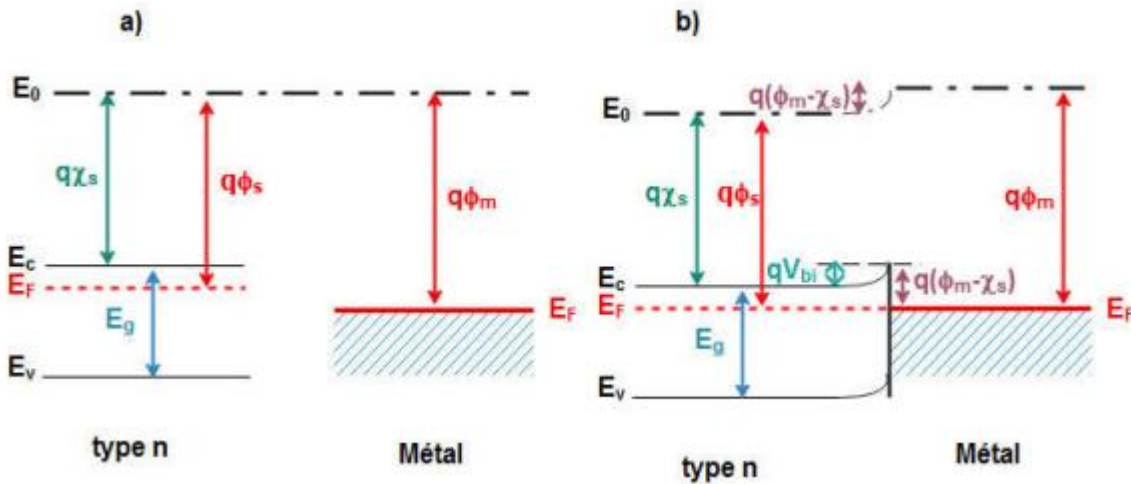


Figure I.10 : Diagramme énergétique ; (a) semi-conducteur/métal isolés (b) semi-conducteur/métal en contact à l'équilibre.

Pendant la mise en contact des deux matériaux, en raison de la différence des travaux de sortie, les électrons diffusent du semi-conducteur vers le métal. Ce phénomène entraîne l'apparition d'une zone de charge d'espace. La tension de diffusion augmente progressivement pour atteindre la valeur d'équilibre V_{bi} (Figure I.10 (b)) qui arrête la diffusion et définit l'état d'équilibre (V_{bi} est donnée par la différence des travaux de sortie des deux matériaux) [8].

• Homojonction

L'homojonction est la juxtaposition de deux matériaux semi-conducteurs de même nature mais de type différent : l'une de type P et l'autre de type N. La figure I.11 montre la formation de cette jonction.

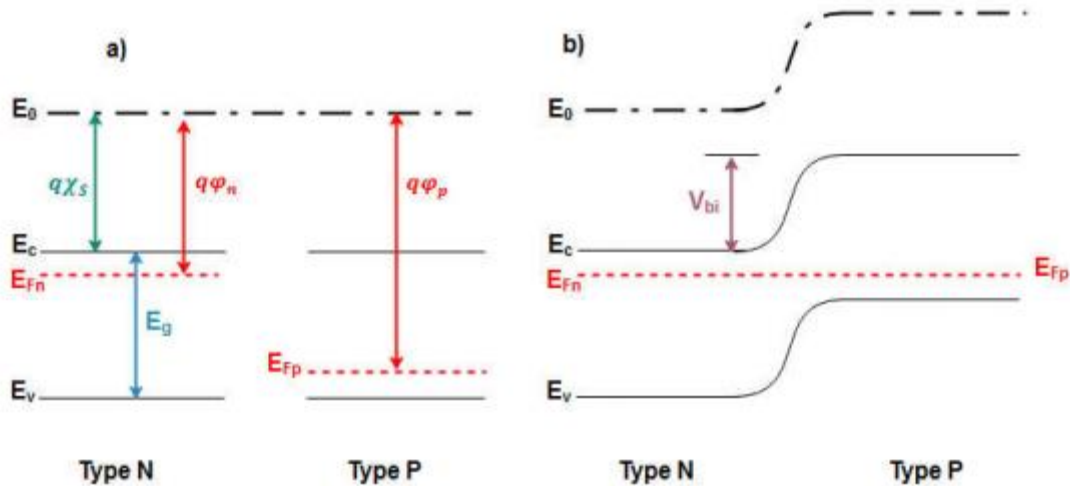


Figure I.11 : Diagramme énergétique ; (a) régions p/n isolées (b) régions p/n en contact à l'équilibre.

Cette adjonction entraîne des courants de diffusion d'électrons et de trous au voisinage de la jonction. Une barrière de potentiel est alors créée. Elle s'oppose aux courants de diffusion des porteurs majoritaires de chaque zone. Cette barrière ne dépend que des travaux de sortie de deux régions (V_{bi} correspond à la différence entre les niveaux de Fermi) [8].

• Hétérojonction

Elle se forme au contact de deux matériaux semi-conducteurs possédant des valeurs de gaps différentes (Figure I.12). Contrairement à l'homojonction, l'hétérojonction laisse apparaître un pic dans la bande de conduction (Figure I.12 (b)) qui peut également survenir dans la bande de valence selon la nature et le dopage des deux semi-conducteurs.

Dans ce cas la barrière d'énergie dépend du gap, de l'affinité électronique et de la concentration des dopants des deux semi-conducteurs [8].

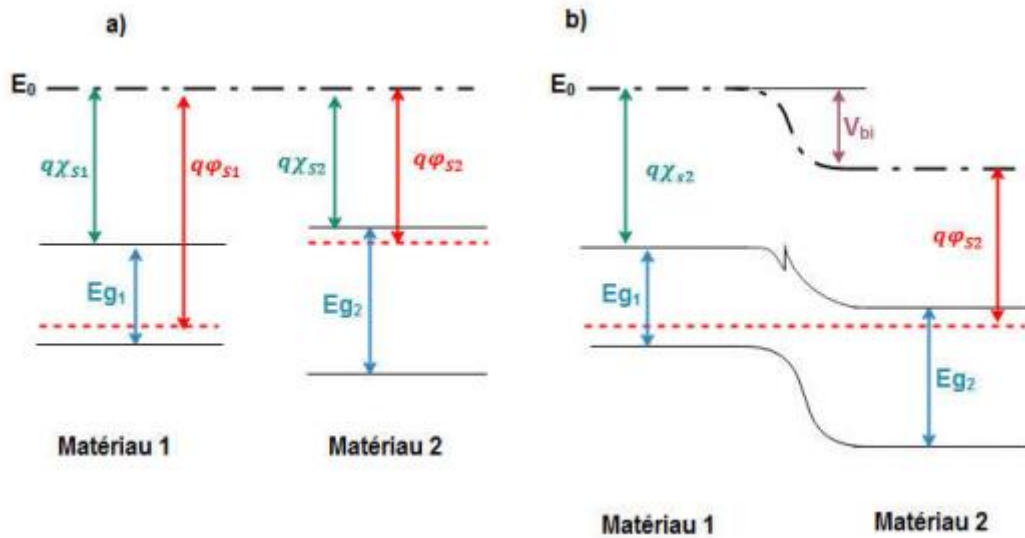


Figure I.12 : Diagramme énergétique illustrant la formation de l'hétérojonction ; (a) régions p/n isolées (b) régions p/n en contact à l'équilibre.

I.7.4 Caractéristique J-V d'une cellule solaire

I.7.4.1 Sous obscurité

Dans l'obscurité la cellule solaire ne produit aucun courant, la densité de courant totale traversant la cellule solaire dans l'obscurité J_D (J_{Dark}) est donnée par:

$$J_D = J_0 \left[\exp\left(\frac{qV}{AK_B T} - 1\right) \right] \quad (I.3)$$

Ou par le courant :

$$I_D = I_0 \left[\exp\left(\frac{qV}{AK_B T} - 1\right) \right] \quad (I.4)$$

Où K_B est la constante de Boltzmann (1.38×10^{-23} J/K), T la température absolue en degrés Kelvin, q la charge élémentaire (1.602×10^{-19} C), A le facteur d'idéalité de la diode et J_0 densité de recombinaison des porteurs minoritaires dans les deux régions quasiment neutres n et p, leur valeur est définie par l'équation (I.5)

$$J_0 = q \left(\frac{D_p n_i^2}{L_p N_D} + \frac{D_n n_i^2}{L_n N_A} \right) \quad (I.5)$$

Où D_n et D_p sont respectivement les coefficients de diffusion des porteurs minoritaires dans les matériaux n et p ; n_i la concentration intrinsèque ; L_n et L_p les longueurs de diffusion des

minoritaires dans les régions n et p ; N_A et N_D les concentrations de dopage dans les régions P et N [8].

I.7.4.2 Sous Ensoleillement

La caractéristique d'une cellule solaire sous éclaircissement se fait selon deux cas, soit le cas idéal (pertes négligeables) ou le cas réel dont lequel l'effet des résistances parasites sera prise en compte [8].

• Cas Idéal

Quand une cellule solaire reçoit un flux lumineux, un certain nombre de photon transportant une quantité d'énergie qui va engendrer la création d'un photo-courant à ses bornes. Ce photo-courant généré est proportionnel au flux lumineux. La caractéristique (J-V) correspondante au cas idéal est représentée par l'équation (I.6) Ou le premier terme représente le courant sous obscurité (J_{Dark}) et le deuxième terme J_{ph} représente le courant photo-généré [8].

$$J = J_0 \left[\exp\left(\frac{qV}{AK_B T}\right) - 1 \right] - J_{ph} \quad (I.6)$$

La figure I.13 représente le schéma équivalent de la cellule solaire.

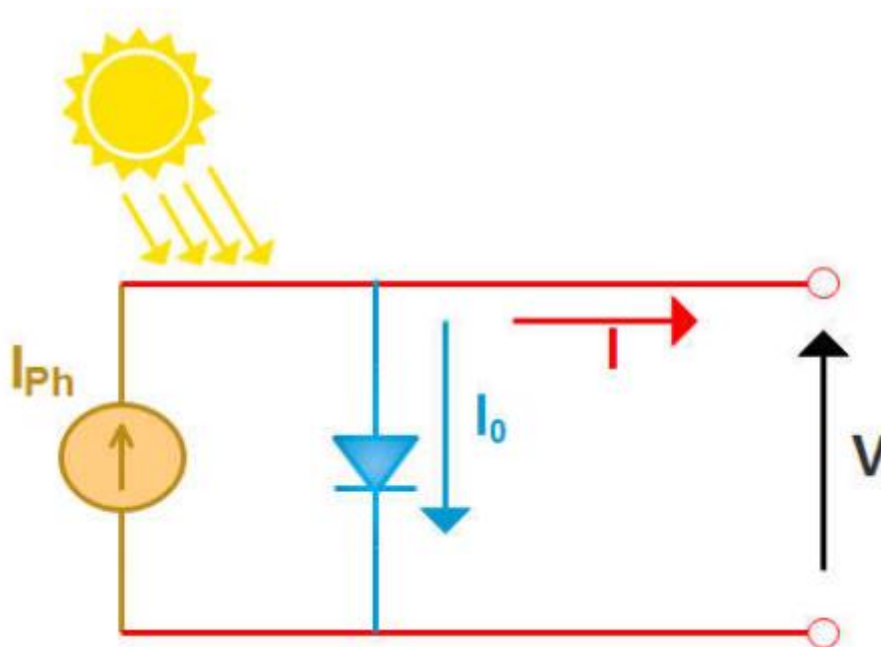


Figure I.13: Schéma équivalent d'une cellule solaire dans le cas idéal.

• Cas Réel

Le cas réel de la cellule solaire en fonctionnement peut se référer à un générateur de courant avec une diode en parallèle. Cette dernière représente le comportement de la cellule en obscurité (jonction PN), en ajoutant les deux résistances parasites série R_s et parallèle R_{sh} pour assimiler les pertes dans la cellule [8].

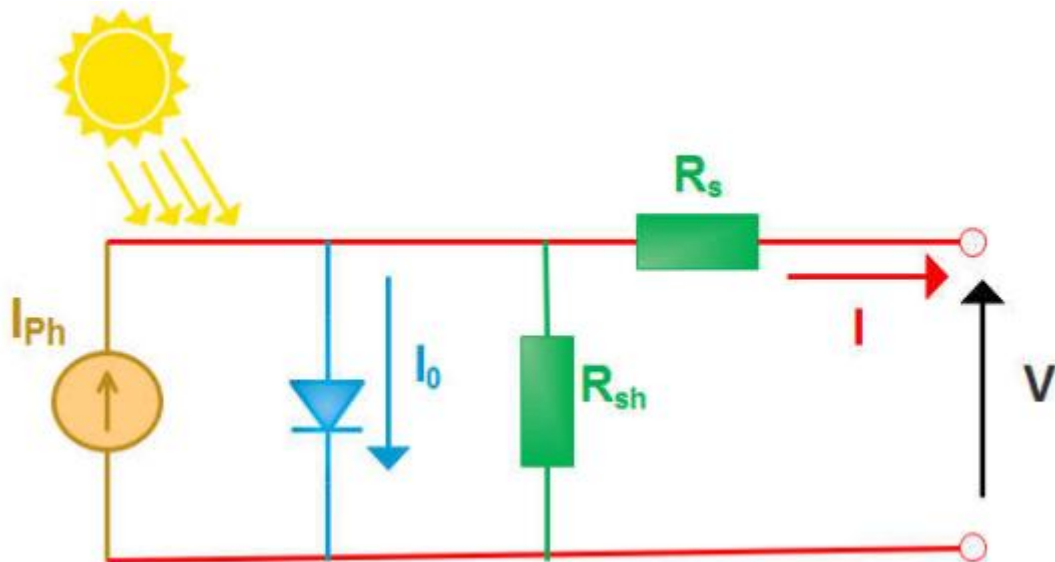


Figure I.14 : Schéma équivalent d'une cellule solaire dans le cas réel.

Le schéma de la figure I.14 est représenté mathématiquement par l'équation (I.7)

$$J = J_{ph} - J_0 \left[\exp \left(\frac{q(V+JR_s)}{AK_B T} \right) - 1 \right] - \left(\frac{V+JR_s}{R_{sh}} \right) \quad (I.7)$$

I.7.5 Paramètres photovoltaïques d'une cellule solaire

Le comportement de la cellule solaire est caractérisé à travers les quatre paramètres électriques (J_{sc} , V_{oc} , FF, η) ou J_{sc} représente la densité du courant de court-circuit, la tension en circuit ouvert V_{oc} , FF le facteur de remplissage (forme) et η le rendement de conversion de la cellule solaire. La figure I.15 illustre la caractéristique $J(V)$ d'une cellule solaire en obscurité et sous ensoleillement en présentant tous les paramètres électriques. [8].

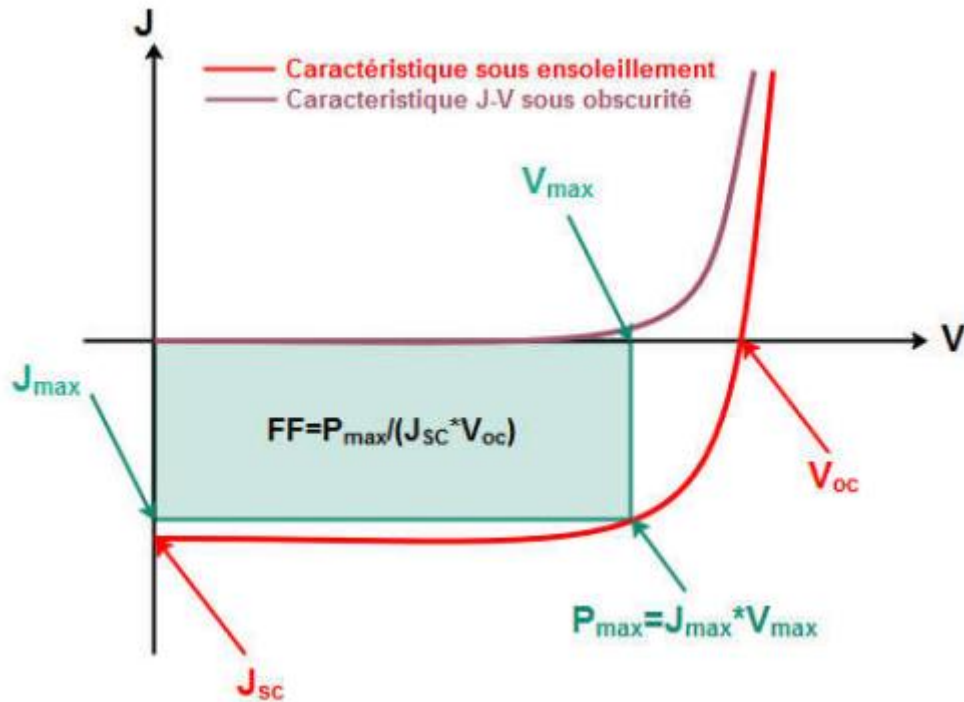


Figure I.15 : Caractéristique $J(V)$ d'une cellule solaire dans l'obscurité et sous ensoleillement.

I.7.5.1 Densité du courant de court-circuit (J_{sc})

J_{sc} correspond à la densité du courant avec une tension nulle aux bornes de la cellule solaire ($V=0$), A partir du spectre solaire et en suivant l'équation (I.8) [35]. [36] on peut calculer la valeur de la densité du courant de court-circuit.

En prenant le cas idéal ou $R_s=0$ et $R_{sh}=\infty$, la densité de courant de court-circuit varie proportionnellement avec l'éclairement [37]. [38].

$$J_{sc} = q \int F(\lambda) \{1 - R(\lambda)\} IQE(\lambda) d\lambda \quad (I.8)$$

Où $F(\lambda)$ est la densité du flux incident sur une unité de surface par unité de temps, $R(\lambda)$ est le coefficient de réflexion et IQE est le rendement quantique interne de la cellule solaire.

I.7.5.2 Tension en circuit ouvert V_{oc}

Le premier paramètre caractéristique d'une cellule photovoltaïque est la tension en circuit ouvert V_{oc} . La tension V_{oc} est définie comme la tension maximale que peut générer la cellule. Celle-ci se mesure lorsque le courant est nul. L'équation (I.9) décrivant la tension V_{oc} peut être déduire de l'équation (I.6) [8].

$$V_{oc} = \frac{AKT}{q} \ln \left(\frac{J_{ph}}{J_0} + 1 \right) \quad (I.9)$$

I.7.5.3 Facteur de forme (FF)

Le facteur de forme permet de qualifier la qualité de la cellule solaire, il est calculé à partir de la formule (I.10). Le facteur de forme représente le rapport entre la puissance maximale fournie par la cellule sur le produit de $V_{oc} \times J_{sc}$. Ce rapport doit avoir une valeur la plus proche possible de 1 (100%) [8].

$$FF = \frac{P_{max}}{V_{oc} \times J_{sc}} = \frac{V_{max} \times J_{max}}{V_{oc} \times J_{sc}} \quad (I.10)$$

I.7.5.4 Rendement photovoltaïque (η)

A partir de des paramètres V_{oc} , J_{sc} et FF , il est possible de déterminer le rendement de la cellule. C'est le paramètre le plus important car il permet d'évaluer les performances de la cellule PV. Le rendement exprime le rapport entre la puissance générée par la cellule (P_{out}) et la puissance incidente (P_{in}) du rayonnement lumineux éclairant la cellule dans les applications terrestres le spectre solaire AM1.5 (1000 W/m²) ou spatiale AM0 (1376 W/m²). Il se calcule selon la formule suivante (I.11) [8].

$$\eta = \frac{P_{out}}{P_{in}} = \frac{V_{oc} \times J_{sc} \times FF}{P_{in}} \quad (I.11)$$

I.7.5.5 Rendement quantique de la cellule QE

Le rendement quantique définit la probabilité d'un transfert énergétique à partir d'un photon incident à un électron du cristal, ce paramètre décrit la qualité et quantité de la conversion photovoltaïque dans la cellule solaire. Car il permet en premier lieu de mesurer le rapport entre les électrons générés et les photons incidents et en deuxième lieu, la quantification des pertes dans la cellule solaire afin d'interpréter les résultats pour améliorer le rendement de la conversion [39], [40].

$$QE = \frac{\Delta J/q}{\phi} = \frac{\text{paires(electron-trou)collectees}}{\text{photons incidents}} \quad (I.12)$$

Parmi les propriétés des matériaux qui affectent le rendement quantique, le coefficient d'absorption, la profondeur de la jonction, l'épaisseur de la zone de charge de déplétion, la durée de vie des porteurs et leur mobilité, la recombinaison en surface, nombre des couches

formant le dispositif [39], [40]. La figure I.16 [41] illustre les différents types de pertes affectant le rendement quantique.

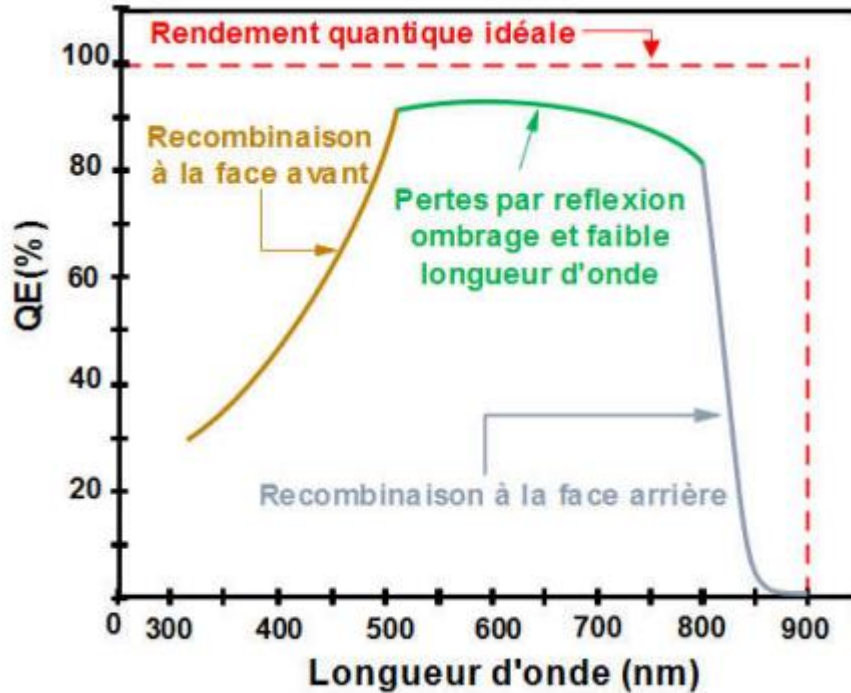


Figure I.16 : Rendement quantique externe de la cellule solaire et les différents types de perte. [41].

I.7.6 Les différents types de perte dans une cellules solaires

Le rendement d'une cellule solaire est limité par différents types des pertes. Ces pertes peuvent être classées selon les pertes intrinsèques et extrinsèques ou selon les pertes optiques et électriques.

I.7.6.1 Pertes extrinsèques

Ce sont les pertes que on peut éliminer. Il s'agit notamment des pertes due à la réflexion, l'ombrage du aux contacts, la résistance série, la collecte incomplète des porteurs photo générés, l'absorption dans la couche fenêtre et la recombinaison non radiative.

I.7.6.2 Pertes intrinsèques

Les pertes intrinsèques sont généralement dues aux phénomènes suivants [8] :

-La thermalisation pour les photons incidents ayant une énergie supérieure à celle du gap (E_g)
: $E_g < E_{ph}$.

-La transparence de la cellule pour les photons incidents ayant une énergie inférieure à celle du gap (E_g) : $E_{ph} < E_g$.

-La recombinaison radiative dans la cellule.

La figure I.17 présente les différentes sources de perte optique et électrique.

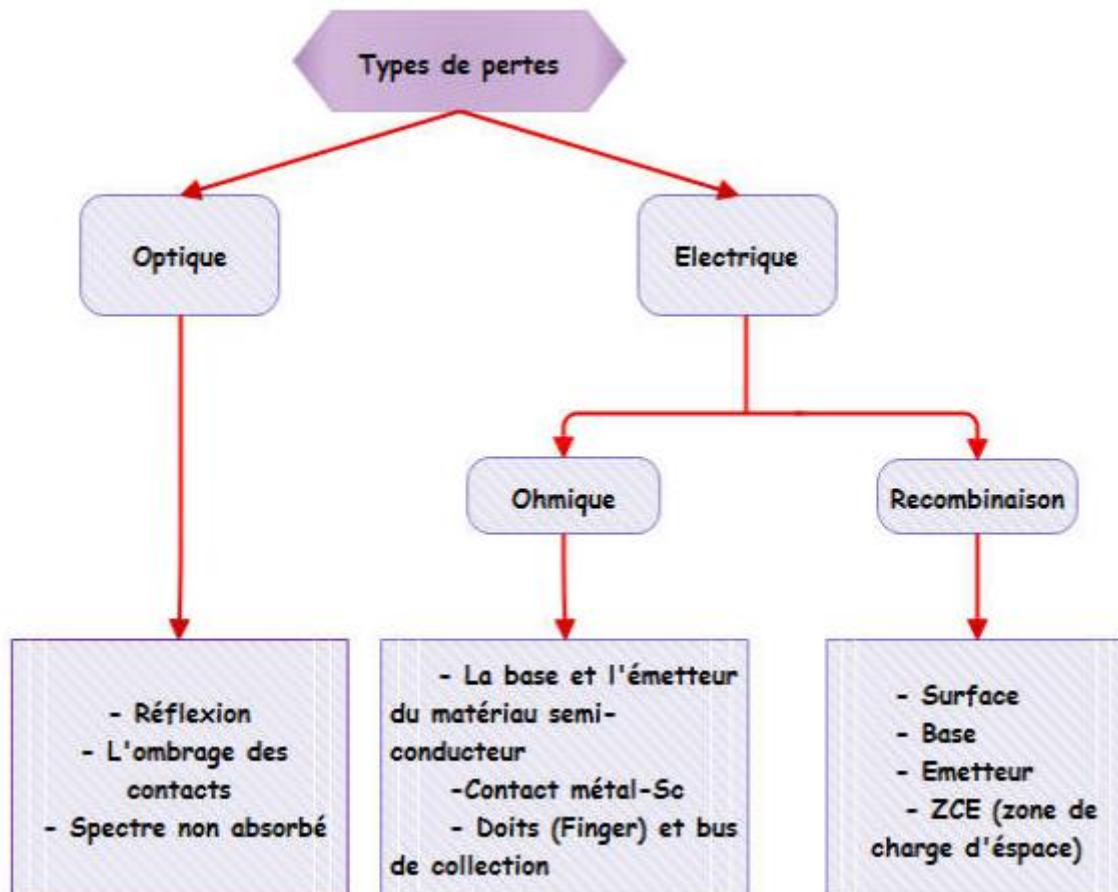


Figure I.17 : Différents pertes optiques et électriques existant dans une cellule solaire [41].

I.7.7 Résistances parasites

Une cellule photovoltaïque n'est jamais parfaite et cela par la présence des résistances parasites illustrées dans la figure I.14, car elles dissipent une partie de la puissance photo-générée par la cellule solaire sous forme de pertes électriques, leur effet dépend de la géométrie de la cellule et de la technologie de fabrication.

I.7.7.1 Résistance série

La résistance série (R_s) qui traduit la résistance aux interfaces causée par l'impédance des électrodes (métallisation de grille et de la face arrière), et le dopage insuffisant dans les régions

quasiment neutre (Emetteur et base). Cette résistance doit donc être la plus faible possible (inférieure à 1Ω) [42] car elle influe sur le facteur de forme (FF). L'impact de la résistance série sur la caractéristique J-V est illustrée dans la figure I.18 ou on peut noter que la résistance R_s diminue le courant de court-circuit J_{sc} , ce qui rend l'épaisseur de l'émetteur et la surface du contact métal-semiconducteur des points essentiels pour l'optimisation du rendement de la cellule.

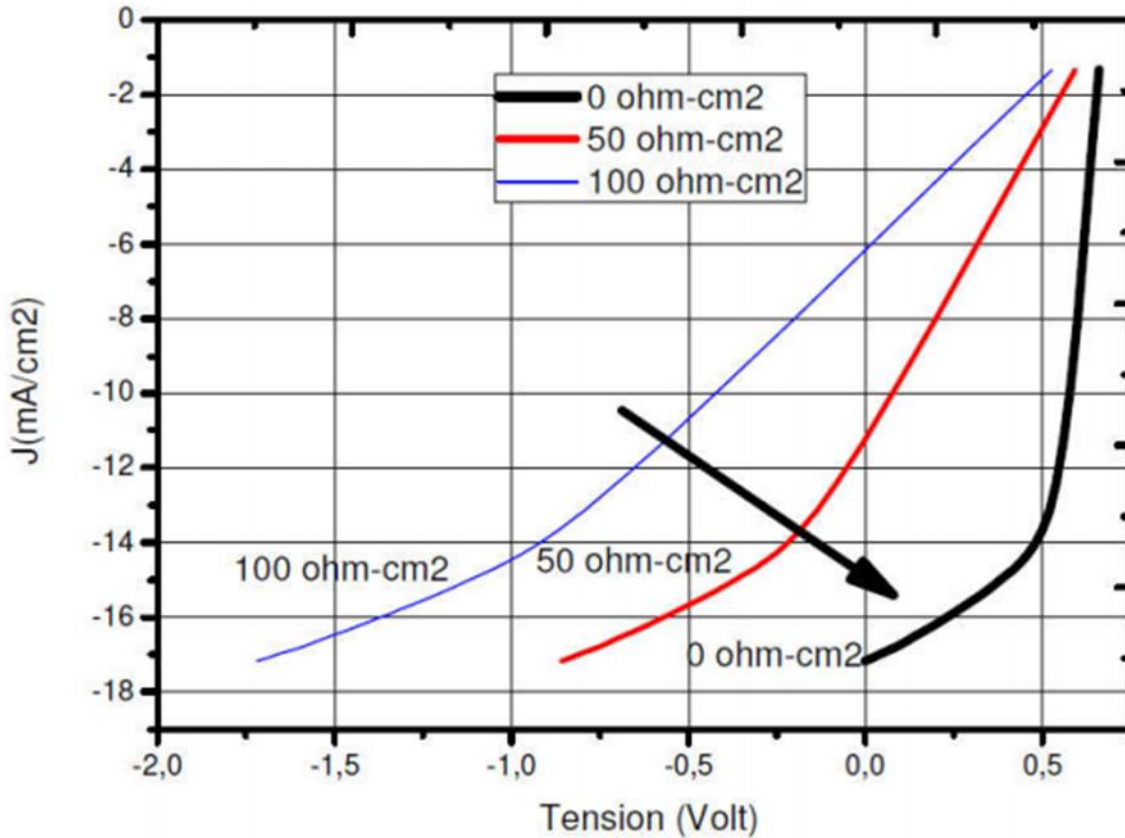


Figure I.18 : L'effet de la résistance série sur la caractéristique J-V, simulation SCAPS-1D [41].

I.7.7.2 Résistance shunt

Les facteurs gérant la résistance parallèle (shunt) sont globalement :

- Les défauts de fabrication tel que la diffusion des contacts dans les matériaux composant la jonction PN [43].
- La diminution de l'épaisseur de la cellule dans la filière couche mince [43].

Pour avoir une bonne fonctionnalité de la cellule solaire la résistance shunt doit-être supérieure à 10^4 [41].

I.7.8 Recombinaison

Un phénomène de recombinaison donné est caractérisé par un taux de recombinaisons R , correspondant à un nombre de recombinaisons par unité de temps et par unité de valeur de matériau semi-conducteur. Il existe trois types principaux de mécanismes : l'effet Auger, la recombinaison radiative (Band à Band) et la recombinaison assistée par un piège dans la bande interdite appelée aussi recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH) [8]

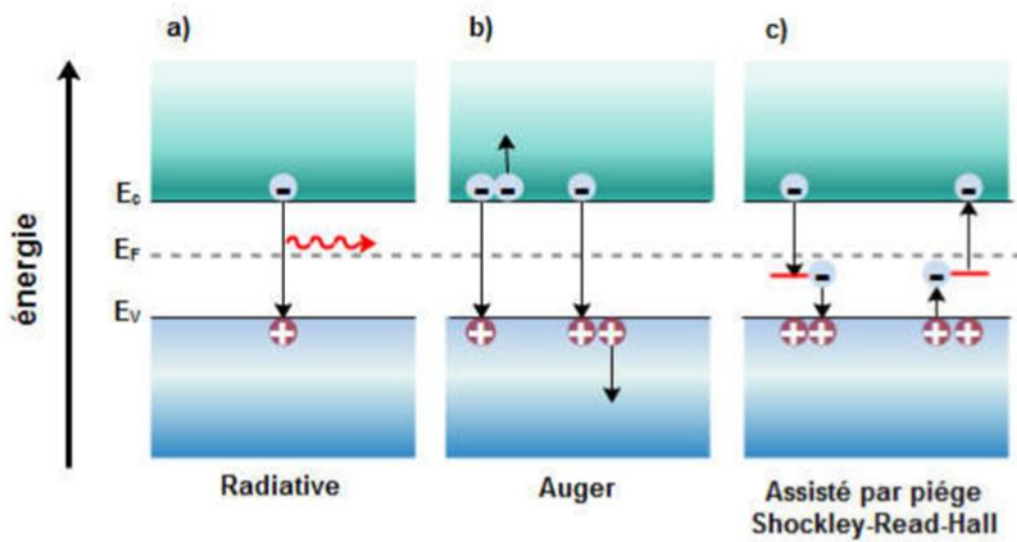


Figure I.19 : Principaux mécanismes de recombinaison dans un semi-conducteur (a) radiative, (b) Auger et (c) SRH.

I.7.8.1 Recombinaison radiative

Les semi-conducteurs à gap direct englobent généralement ce type de recombinaison qui est le mécanisme inverse de l'absorption optique ou un électron de la bande de conduction se combine avec un trou dans la bande de valence en émettant un photon qui possède une énergie équivalente à celle du gap de la bande interdite du matériau. Ce mécanisme se caractérise par la courte durée de vie des porteurs de charge [8].

I.7.8.2 Recombinaison indirecte (assistée par piège)

Contrairement au premier phénomène, ce type de recombinaison se produit dans les semi-conducteurs à gap indirect. La recombinaison assistée par un piège dans la bande interdite appelée aussi recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH) provient des impuretés ou de la structure du réseau. La position la plus efficace pour les pièges pour permettre cette transition sera située en milieu de bande interdite. Le taux de recombinaison-génération résultant R , peut être donné par l'équation I.13 et la densité des porteurs libres est donnée par l'équation I.14 [42]:

$$R_{SRH} = \frac{pn - n_i^2}{\tau_{SRH,n} \left(p + n_i e^{\left(\frac{E_R - E_{Fi}}{KT} \right)} \right) + \tau_{SRH,p} \left(n + n_i e^{\left(\frac{E_R - E_{Fi}}{KT} \right)} \right)} \quad (I.13)$$

$$U_{SRH} = \frac{\sigma_p \sigma_n V_{th} N_t (pn - n_i^2)}{\tau_{SRH,n} \left(p + n_i e^{\left(\frac{E_R - E_{Fi}}{KT} \right)} \right) + \tau_{SRH,p} \left(n + n_i e^{\left(\frac{E_R - E_{Fi}}{KT} \right)} \right)} \quad (I.14)$$

Avec :

$\tau_{SRH,n}$, $\tau_{SRH,p}$: sont respectivement les durées de vie d'électrons et des trous.

n_i : la concentration intrinsèque.

E_R : l'énergie associée aux centres piège.

N_t : la concentration des défauts.

σ_p , σ_n : les sections efficaces de capture par le trou et l'électron.

V_{th} : la vitesse thermique.

E_i : le niveau de Fermi intrinsèque.

U_{SRH} : les porteurs libres ($\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$).

I.7.8.3 Recombinaison Auger

Ce phénomène est apparait en présence d'une forte concentration de porteurs libres, comme dans les semi-conducteurs à gap indirect [42]. L'énergie émis pendant cette recombinaison pousse un électron à un niveau supérieur de la bande de conduction, ou un trou vers un niveau plus profond de la bande de valence [8].

I.8 Avantages et Inconvénients de l'énergie photovoltaïque

I.8.1 Avantages

- Une fiabilité élevée car la majorité des fabricants des modules photovoltaïques garantissent leurs produits jusqu'à 25 ans.
- L'option modulaire que les panneaux photovoltaïques facilitent l'adaptation du montage avec des applications de puissances allant du milliwatt au Mégawatt.
- Coût de fonctionnement et d'entretien réduits.
- Cette technologie possède un impact positif sur le plan écologique. [8].

I.8.2 Inconvénients

- Coût de fabrication de certaines filières photovoltaïques reste élevé à cause de son investissement.
- Les installations solaires nécessitent des surfaces énormes pour leur fonctionnement.
- Le rendement reste relativement faible jusqu'à présent (28% sur le marché).
- Faible compétition entre les générateurs solaires face aux générateurs Diesel ou à Gaz naturel.
- Le point le plus crucial est le stockage d'énergie qui nécessite des batteries, ce qui influe sur le coût de l'installation [8].

I.9 Conclusion

Ce chapitre nous a permis en premier lieu de donner une description de l'énergie solaire et ces différentes gammes de rayonnement. Nous avons présenté un aperçu historique sur les cellules solaires et leurs évolutions en décrivant ces différentes filières. En second lieu nous avons défini des notions fondamentales qui sont importantes sur l'effet photovoltaïque. Ensuite nous avons présenté une description du fonctionnement de la cellule solaire décrivant les différents paramètres de cette dernière. Finalement, nous avons établis les différents phénomènes agissant sur le rendement de la cellule solaire tel que les pertes (électrique et optiques), et les résistances parasites, la recombinaison.

Chapitre II : Description des matériaux pour le photovoltaïque

II.1 Introduction

La modélisation numérique des dispositifs photovoltaïque à semi-conducteur est complexe. Elle dépend extrêmement de plusieurs facteurs tels que les propriétés physique, électrique et optoélectroniques du matériau qui regroupent la recombinaison, la durée de vie et la mobilité des porteurs de charge, la longueur de diffusion, la réflexion et le coefficient d'absorption., Pour cela on opte souvent pour la résolution numérique des équations aux dérivées partielles avec certaines conditions aux limites. La technique de simulation et modélisation des cellules solaires nécessite la connaissance des propriétés physiques et électroniques des matériaux constituant ces dispositifs. Dans ce chapitre nous allons décrire des différents nouveaux matériaux utilisés dans notre travail ainsi que leurs propriétés physiques, morphologique, électriques et optoélectroniques.

II.2 Les cellules photovoltaïques couches mince à base de Chalcopyrite

II.2.1 Le di-séléniure de cuivre et indium (CIS ou CIGS)

Réalisées en 1975 par "S. Wagner et coll de Bell Telephone" [44], les cellules CIGS utilisent aussi le principe de la jonction p-n. Elles renferment un absorbant composé de cuivre, de gallium, d'indium et de sélénium. Cette couche de 1 à 2,5 μm d'épaisseur étant de type p, nécessite d'être recouverte d'un matériau de type n, les cellules CIGS sont aussi des cellules de type hétérojonction. Du fait que leur coefficient d'absorption optique, le rendement record de 22.3 % a été atteint levers la fin de l'année 2015 par une cellule solaire d'environ 0,5 cm^2 de Solar Frontier-Japon [45], et 25 % par simulation [46]. Ces résultats mettent le CIGS comme le CdTe au premier plan des cellules solaires en termes de compromis coût-rendement. Bien que la filière chalcogénure ternaire (CIS) et quaternaire (CuInGaSe_2) et ses nombreuses variantes n'a pas eu la croissance explosive du CdTe, elle reste encore la plus pertinente pour se lancer aujourd'hui dans les couches minces car elle combine le meilleur compromis de haut rendement, de bonne stabilité et de faible coût potentiel sans offenser l'environnement. Les principales améliorations sont venues de l'élargissement de la bande interdite du CuInSe_2 par l'utilisation d'alliages du type CuInSe_2 et du CuGaSe_2 (diséléniure de cuivre et de gallium), avec des gaps, respectivement, 1.02 eV et de 1.67 eV [46], [47]. En plus ces matériaux

possèdent certaines caractéristiques exceptionnelles telles que : le coefficient d'absorption qui a presque le même seuil que celui du c-Si mais il est 100 à 1000 fois plus large dans la gamme 1.1 à 2.6 eV, ce qui permet une épaisseur d'absorbeur de 1 à 2 μm , la longueur de diffusion des porteurs minoritaires particulièrement liées aux applications photovoltaïques, et surtout la tolérance aux défauts qui permet une production à très grande échelle. En outre, il existe d'autres matériaux basés sur des alliages et qui sont extrêmement performants, mais aussi extrêmement chers (comme l'arséniure/indium de gallium InGaAs). Ils sont utilisés beaucoup plus pour les applications spatiales à l'aide de concentrateurs de lumière.

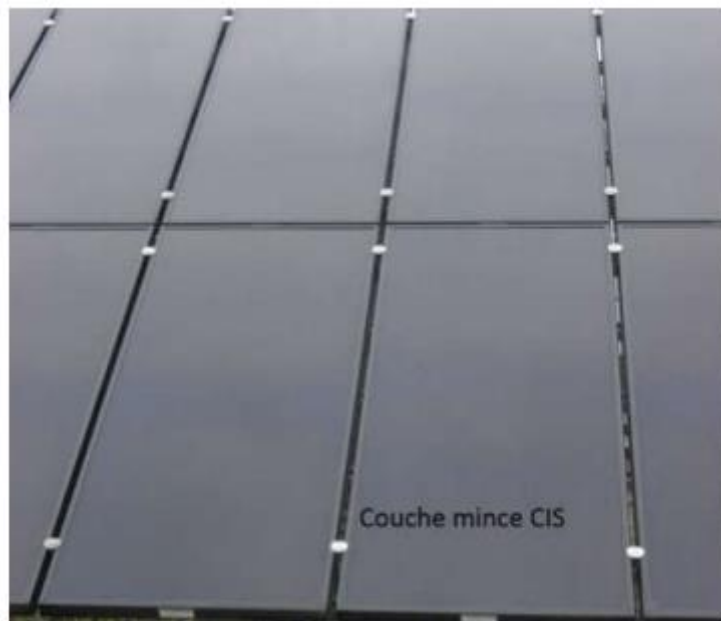


Figure II.20 : Cellule solaire au CIS en couche mince [48].

Les cellules en CIGS résistent mieux à l'échauffement que les cellules au silicium cristallin, mais moins bien que les cellules au CdTe. En plus, elles captent la lumière au début et à la fin de journée, comme toutes les couches minces [8]. Pour la filière CdTe le problème de toxicité dû au cadmium a ralenti son développement. Le deuxième point néfaste est la rareté de tellure. Il pourrait venir à manquer ou ne plus satisfaire les filières qui l'utilisent. Les cellules au tellure de cadmium (CdTe) offrent des avantages liés à la technologie des couches minces : légèreté, robustes.

II.2.2 Architecture des cellules CIGS

Les cellules solaires en couches minces à base de CIGS font parties de la famille des cellules à hétérojonction. Dans cette cellule, le CIGS est considéré comme étant l'absorbeur de la cellule de type p (d'où les paires électrons trous sont générées sous illumination). L'hétérojonction p-n à base de CIGS est formée en juxtaposant une couche appelée « couche tampon ». Cette dénomination provient du fait qu'elle joue aussi un rôle de protection physique du CIGS lors du dépôt par pulvérisation cathodique des couches suivantes [51]. Elle est appelée aussi couche fenêtre, car elle laisse le rayonnement s'infiltrer jusqu'à l'absorbeur. A présent, les meilleurs rendements sont obtenus en exploitant des couches tampon à base de sulfure de cadmium (CdS). De plus, il est considéré comme étant le matériau le plus utilisé. En raison de la toxicité du cadmium, d'importantes tentatives sont réalisées pour le développement des couches tampons alternatives ($Zn(O,S)$, $(Zn,Mg)O$, $In_2(S,Se)_3$, etc.). L'épaisseur typique d'une couche tampon en CdS est d'environ 50 nm. La méthode la plus courante de dépôt du CdS est le bain chimique (Chemical Bath Deposition, CBD). Puis une couche d'oxyde de zinc dopé aluminium, donc fortement dopée de type n, forme la fenêtre avant, conductrice, et transparente, pour récupérer les électrons. Un contact ohmique, comme par exemple une grille de Ni/Al, peut être ajouté pour collecter le courant de manière plus efficace. Le CIGS est un semi-conducteur de bande interdite direct avec un large coefficient d'absorption : 2 μm d'épaisseur sont suffisants par rapport à 200 μm pour l'homojonction au silicium. La structure d'une telle cellule solaire est schématisée sur la Figure II.21. A l'arrière de la jonction, le substrat en verre, le molybdène (Mo) forme l'électrode de contact arrière (contact ohmique). Elle a pour rôle principal de collecter les porteurs de charges générés dans la cellule. D'un point de vue électrique, elle constitue le pôle positif du générateur photovoltaïque, et son épaisseur est d'environ 300 nm à 1000 nm. La méthode de dépôt la plus utilisée pour le contact arrière est la pulvérisation cathodique [8].

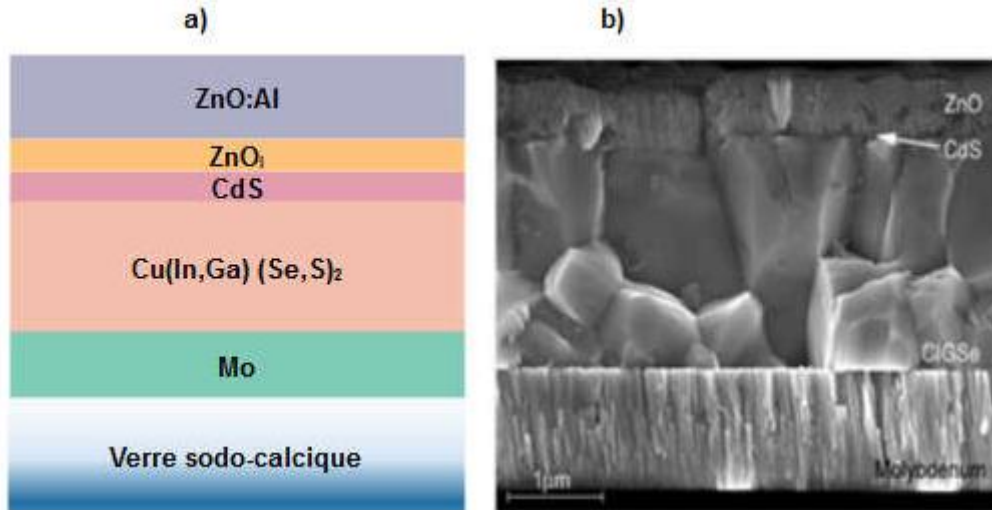


Figure II.21 : Structure en coupe d'une cellule CIGS : (a) schéma, (b) Image au microscope à balayage (MEB) [52].

II.2.3 Structure du matériau CIGS

Le matériau originaire du CIGS est le CIS (CuInSe_2). C'est un semi-conducteur I-III-VI₂ qui possède une structure cristalline *chalcopyrite*. Cette structure tétragonale peut être décrite comme une superposition de deux structures zinc-blende interpénétrés (anions et cations) cubiques à faces centrées dans lequel les sites tétraédriques sont occupés par des atomes du groupe III (Se) (anions) et les autres sites sont occupés de manière ordonnée par des atomes des groupes I (Cu) et II (In) (cations) [53]. La Figure II.22 présente les différences structures cristallines des trois matériaux semi-conducteurs utilisés dans le photovoltaïque : le Si, le CdTe et le CIGS.

Un des paramètres clés pendant l'élaboration des cellules CIGS est l'orientation cristalline du CIGS qui dépend extrêmement des conditions dans lesquelles il est élaboré [54], et aussi des propriétés du substrat [55]. La majorité des travaux montrent que l'orientation (220/204) permet d'obtenir de meilleures performances photovoltaïques. Il n'existe pas d'explication claire de cet effet pour le moment. Il a été noté qu'une orientation préférentielle en (220/204) permet une meilleure diffusion des atomes de Cd dans le CIGS lors du dépôt de la couche de CdS. Cela peut avoir pour effet de générer une couche d'inversion dans le CIGS (jonction enterrée), améliorant la qualité de la diode [56]. Malgré que cette hypothèse est aussi contestée [53], d'autres études avancent plus généralement que l'orientation (220/204) permet de former une interface CdS/CIGS avec moins de défauts [57], [58].

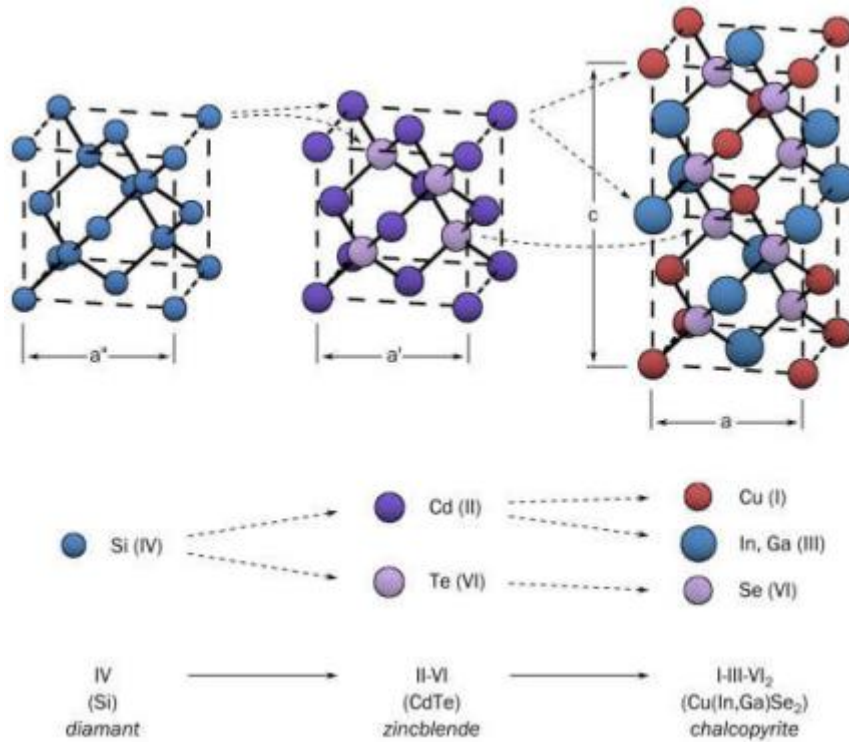


Figure II.22 : Comparaison des mailles élémentaires des structures cristallines du Si, du CdTe et du CIGS. Structure chalcopyrite [53].

Tableau II.2 : Aperçu du marché des métaux [59].

| | Ressources (t) | Réserves (t) | Production minière 2015 (t) | Prix (\$/kg) | | Variation du prix 2010-2015 (\$/ (kg)) | Autre utilisation majeur |
|-----------|----------------|--------------|-----------------------------|--------------|-----|--|--------------------------|
| Cu | 2M identifié | 720 000 | 18 700 | 7 | 6 | 5-10 | Conducteur |
| In | 95000 | 50 000 | 755 | 705 | 540 | 200-800 | ITO |
| Ga | >1M | ? | 435 | 365 | 295 | 150-1000 | GaN |
| Se | ? | 120 000 | ? | 50 | 50 | 11-165 | Impuretés |

II.2.4 Propriétés optiques

Le rendement des cellules solaires dépend principalement de la lumière absorbée par la couche absorbante. Du point de vue technologique, la couche absorbante doit avoir un gap optimal pour absorber la plus large gamme des longueurs d'ondes du spectre solaire avec un coefficient d'absorption élevé. Les propriétés optiques des couches CuInSe₂ ont été largement étudiées par plusieurs groupes de recherche [60].

Pour la fabrication des cellules solaires en couches minces dans beaucoup d'études, il a été constaté que la relation entre le gap optique E_g et le coefficient d'absorption α pour un semi-conducteur typique est comme suit [61] :

$$\alpha = \beta(h\nu - E_g)^{1/2} \quad (\text{II.15})$$

Avec B , une constante de proportionnalité, qui dépend des densités des états liés à l'absorption de photon et E l'énergie d'irradiation. Cette relation illustre clairement l'influence du gap sur la plage d'énergie dans laquelle le CIGS absorbe. On peut obtenir un gap optique d'une valeur de : $E_g = 1.02 \pm 0.02$ eV.

La figure II.23 compare le coefficient d'absorption optique du CIS (ce qui correspond au plus petit gap possible pour le CIGS et donc la plage d'absorption maximale) à celui des autres matériaux photovoltaïques (Si, CdTe, GaAs, CdS, etc.). On remarque qu'il existe un écart d'un ordre de grandeur entre les matériaux photovoltaïques et le CIS, ce qui montre l'intérêt de ce dernier pour une utilisation en couches minces, Ainsi, une couche de CIGS d'une épaisseur de 1 μm suffit à absorber 95% du spectre solaire pour les photons dont l'énergie est supérieure à E_g . Le gap optique du CuInSe₂ est une fonction aussi de la température, il peut être décrit approximativement par la relation suivante :

$$E_0 - E_g(T) = \left(\frac{\delta T^2}{T + \beta} \right) \quad (\text{II.16})$$

Où E_0 est le gap à 0 K et β est un paramètre du même ordre que la température.

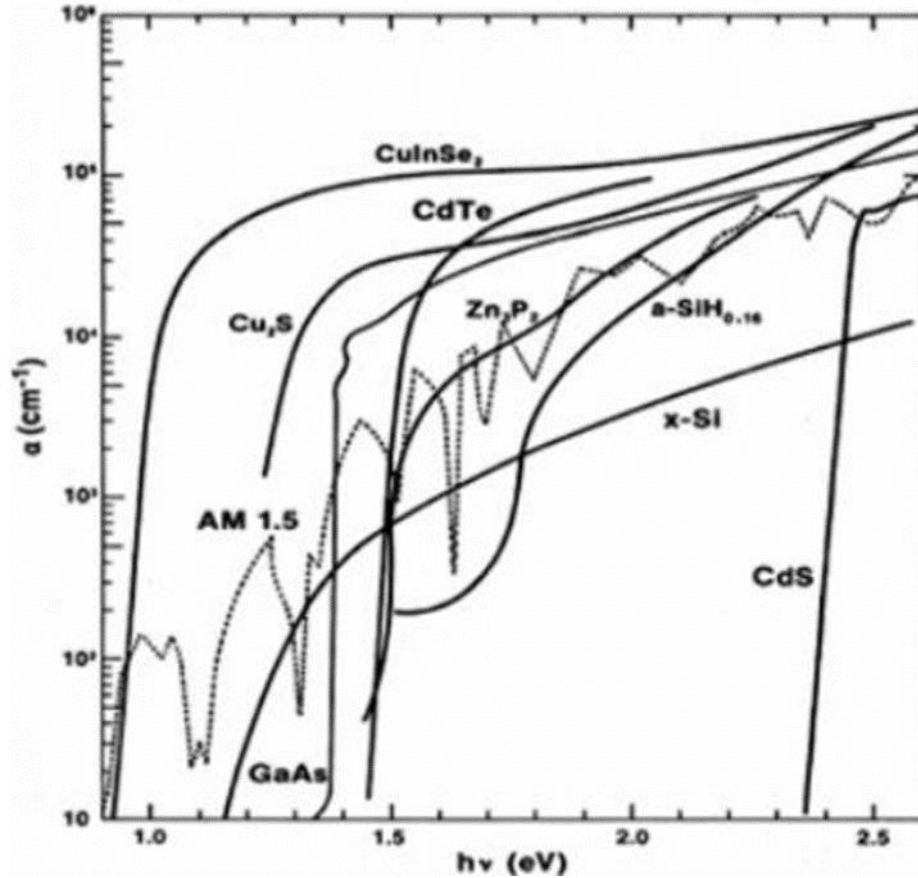


Figure II.23 : Coefficient d'absorption des matériaux [60] (CuInSe₂, CdTe, GaAs, a-Si : H, mono-Si et CdS).

Le CuInSe₂ et le CuGaSe₂ sont les matériaux parents du CIGS avec des gaps directs (E_g) de 1.035 eV et 1.68 eV, respectivement. Cette différence est complètement liée à une différence de minimum de la bande conduction (EC) [62]. Le CIGS est le mélange solide de ces deux matériaux avec un ratio $x = [\text{Ga}] / ([\text{In}] + [\text{Ga}])$ qui détermine le taux d'atomes de gallium remplaçant les atomes d'indium dans la structure, donc la largeur de la bande interdite du CIGS varie en fonction de x entre les valeurs du CIS et du CGS, suivant la loi empirique suivante [63]:

$$E(x)_g = 1.035 + 0.65x - 0.264x(1 - x) \quad (\text{II.17})$$

Par conséquent, le CIGS est un matériau dont E_g peut être varié entre 1.035 eV et 1.68 eV en fonction du taux de gallium. La valeur optimale de E_g résulte de plusieurs facteurs en suivant l'absorption des photons comme paramètres clés. Il est préférable d'avoir une valeur de E_g réduite, permettant d'absorber un spectre plus large (plus grandes longueurs d'onde), pour un courant plus important collecté par la cellule solaire (J_{sc}). En revanche, c'est la valeur de E_g

qui détermine la tension maximale délivrée par la cellule. Afin d'optimiser le rendement de conversion, il est donc nécessaire d'obtenir un compromis idéal entre le courant et la tension. La plupart des résultats expérimentaux publiés dans ce domaine montrent que les meilleurs rendements sont obtenus avec un gap d'environ 1.2 eV [64], ce qui correspond à un taux de Ga proche de 30%. Le choix d'un gradient de concentration en Ga dans la couche d'absorbeur conduit à obtenir une variation de la bande interdite à travers l'épaisseur du matériau. Ce gradient de gap (Band gap grading) fait l'objet de nombreuses études dans le domaine du CIGS, car il peut être manipulé dans les étapes usuelles de dépôt de CIGS tels que la Co-évaporation en 3 étapes [65]. La Figure II.24 présente les trois types de gradients de gap principalement rencontrés dans les cellules CIGS. Dans le premier cas (a), ou aucun gradient n'est présent, le transport des électrons n'est pas particulièrement influencé par la structure de bandes. Dans le deuxième cas qui est appelé gradient simple (b), le gap au contact arrière (E_{g2}) est plus grand que le gap au contact avant (E_{g1}). La différence de potentiel conclu a facilité le transport des électrons vers la zone de charge d'espace [62]. De plus, du fait de la présence d'un large gap au contact arrière, les recombinaisons dans cette même zone sont diminuées [66]. Le troisième profil de gap est appelé double gradient (c). Il est en effet le résultat du mélange d'une première zone allant du contact arrière (E_{g2}) jusqu'à une position communément appelée "notch", d'un gap plus faible (E_{g3}). Ce premier gradient présente les mêmes avantages que le profil simple (différence de potentiel et plus large gap au contact arrière). Dans la seconde partie, le gradient est inversé et remonte jusqu'à un gap E_{g1} . Ce dernier permet d'améliorer le gap effectif à l'hétérojonction et de limiter les recombinaisons à l'interface CIGS/CdS [67]. Ainsi, dans la configuration en double gradient, la valeur du gap minimum (E_{g3}) sera déterminante pour l'absorption des photons et donc le courant en court-circuit (J_{sc}). De même, les valeurs des gaps maximums (E_{g1} et E_{g2}) influenceront sur la tension en circuit ouvert (V_{oc}) [66].

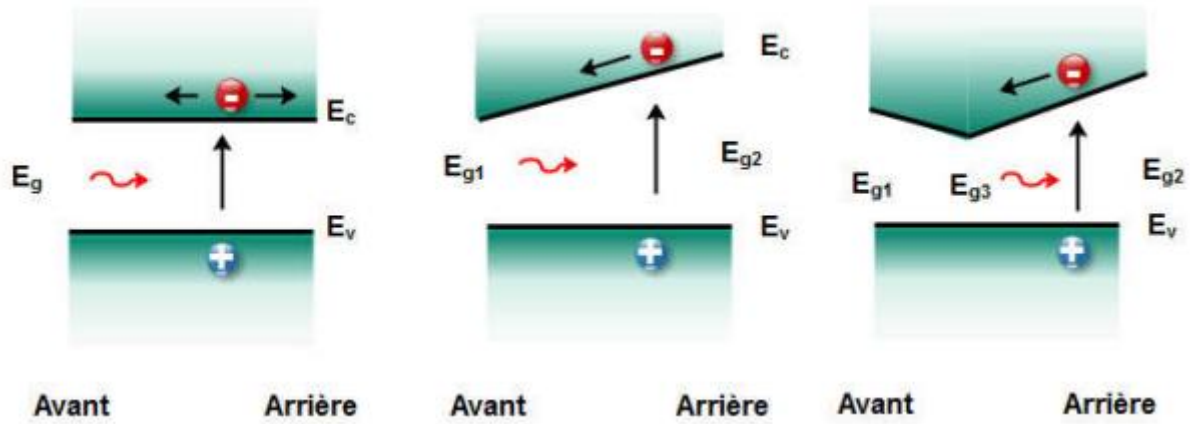


Figure II. 24 : Principaux types de gradients de bande interdite rencontrés dans les couches de CIGS (a) bandes plates, (b) simple gradient et (c) double gradient avec présence d'un notch.

Malgré tout, il a aussi été démontré qu'en présence de trop forts gradients de Ga, le notch (position au gap minimum) peut aussi se comporter comme une barrière aux porteurs de charges et favorise leurs recombinaisons [68]. L'optimisation des gradients de concentration en Ga fait donc partie des points clés pour atteindre de hauts rendements de conversion avec des cellules à base de CIGS.

Les mécanismes de recombinaisons peuvent se produire à différentes positions dans l'épaisseur de la cellule. Les trois principales zones dans lesquelles elles se produisent sont: la zone quasi-neutre du CIGS, la zone de charge d'espace et l'interface CIGS/CdS comme illustre sur la Figure II.25 [69]. Il a été montré que la majorité des recombinaisons se produisent dans le CIGS, c'est-à-dire dans les deux premières zones [70].

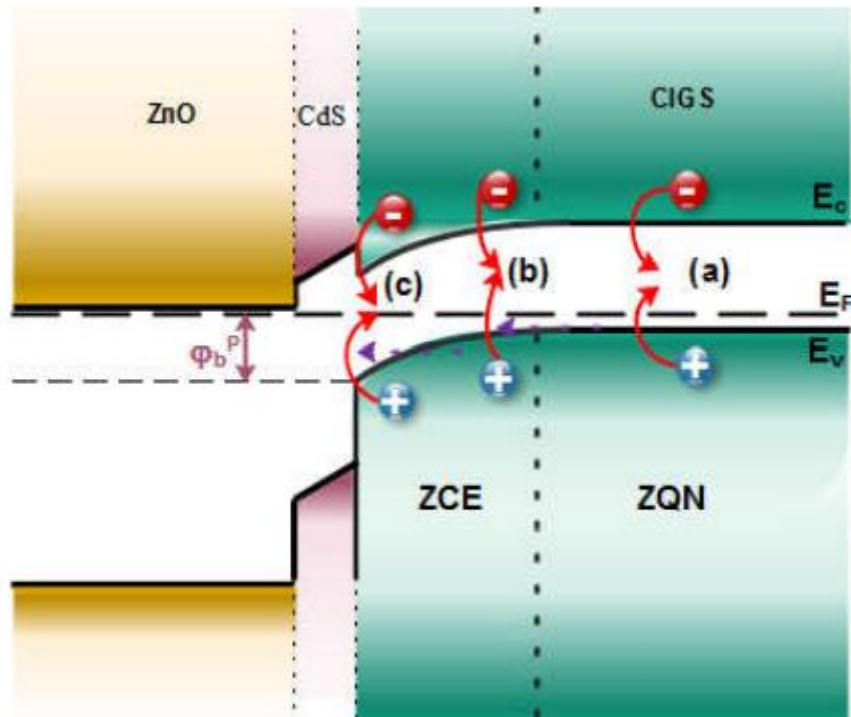


Figure II.25 : Diagramme de bande d'une structure ZnO/CdS/CIGS présentant les trois principales zones de recombinaisons : (a) dans la zone quasi-neutre (ZQN) du CIGS, (b) dans la zone de charge d'espace (ZCE), (c) à l'interface CdS/CIGS. Les flèches horizontales en pointillés indiquent la possible participation de l'effet tunnel aux recombinaisons.

II.3 Avantages et Inconvénients du matériau CIGS

II.3.1 Avantages

- Permet d'obtenir les meilleurs rendements par rapport aux autres cellules photovoltaïques en couche mince.
- Permet de s'affranchir du silicium.
- La cellule peut être construite sur un substrat flexible [8].

II.3.2 Inconvénients

- Les cellules en couche mince nécessitent une surface plus importante pour atteindre les mêmes rendements que les cellules épaisses.
- La rareté de l'indium et du gallium [8].

II.4 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons mené une étude bibliographique plus approfondie sur les nouveaux matériaux utilisés dans les cellules solaires et en particulier les chalcopyrites CIS et CIGS, avec une description de leurs différentes richesses propriétés et architectures.

Chapitre III : Modalisation et simulation

III.1 Introduction

Les dispositifs optoélectroniques ont fait l'objet d'une attention toute particulière ces dernières années, car ils constituent des composants essentiels des systèmes électroniques et optiques, notamment le photovoltaïque. La complexité des mécanismes physiques au sein de tels dispositifs fait de la simulation numérique un outil essentiel pour la prédiction des performances et l'optimisation de la conception. La maîtrise et la compréhension des nouveaux matériaux est très difficile, pour cela, de nombreux chercheurs ont préféré s'investir en simulation afin de gagner du temps.

III.2 Techniques de modélisation

En modélisation numérique, il a été difficile de discrétiser un dispositif au moyen d'une grille « grid » (en 2D) ou d'un maillage « mesh » (en 3D). Un maillage avec une concentration de points uniformément élevée ne peut pas être traité car il contiendrait des millions de points de maillage. Donc, il est nécessaire de choisir un maillage dense dans les régions où l'ensemble des variables d'entrée et de sortie change à des distances faibles ; dans les autres régions, un maillage plus grossier suffit. Un bon choix de la grille détermine si les algorithmes numériques appliqués convergent rapidement et vers une solution correcte ou non [71], [72]. Pour modéliser précisément les propriétés électriques de sorties dans la plupart des types de cellules solaire, il suffit de résoudre les équations de base des semi-conducteurs [73] avec l'approximation dérive diffusion :

- Equation de poisson :

$$-\nabla E = \nabla \cdot (\varepsilon \nabla \Psi) = -q(p - n + N_D^+ - N_A^-) \quad (\text{III.18})$$

- Equations de continuité :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot J_n + G - R_n \quad (\text{III.19})$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \nabla \cdot J_p + G - R_p \quad (\text{III.20})$$

- Equations de derive-diffusion :

$$J_n = -q\mu_n n \nabla \Psi + qD_n \nabla n \quad (\text{III.21})$$

$$J_p = -q\mu_p p \nabla \Psi + qD_p \nabla p \quad (\text{III.22})$$

III.3 Logiciels de simulations les plus utilisées

La simulation numérique est une technique permettant d'étudier et d'analyser le comportement d'un dispositif réel. Une simulation est basée sur un modèle mathématique qui décrit le système. La simulation numérique s'est révélée au fil des années un outil fiable et indispensable pour étudier et comprendre les propriétés des cellules solaires, telles que les propriétés optiques, électriques et mécaniques [74]. Il contribue également à réduire les coûts de traitement et le temps consacré à la fabrication de la cellule solaire en fournissant des informations utiles sur la manière de faire varier les paramètres de production pour améliorer les performances de la cellule [75]. Au fil des années, plusieurs outils de modélisation spécifiques aux dispositifs photovoltaïques à couches minces ont été développés. Un certain nombre de ces outils ont atteint un stade de maturité et sont disponibles pour la communauté photovoltaïque [74].

Durant ces dernières années de nombreux simulateurs solaires ont été développés dans le but de modéliser et simuler les cellules solaires. On peut citer comme suite les programmes de simulation numériques tels que : AMPS, wxAMPS, PC1D, AFORS-HET, ASA, SILVACO, SCAPS. Avec l'évolution de ces modèles numériques, les mécanismes des cellules solaires ont été mieux compris, ce qui a contribué à son tour au développement de la cellule en vue d'améliorer le rendement et les performances [8].

III.4 SCAPS

SCAPS « Solar Cell Capacitance Simulator one Dimension » est un programme de simulation des cellules solaires unidimensionnelles développé à l'Université de Gent en Belgique par l'équipe de chercheurs (Alex Niemegeers, Marc Burgelman, Koen Decock, Johan Verschraegen, Stefaan Degraeve) pour simuler les caractéristiques électriques des dispositifs photoniques tels que les cellules solaires à couches minces [76]-[77].

En premier temps, le SCAPS a été développé pour modéliser des systèmes photovoltaïques comprenant des semi-conducteurs CuInSe₂ et de CdTe. Par la suite, ce programme a été élargi pour d'autres cellules telles que cellules cristallines (Si et GaAs) et cellules amorphes (a-Si et

Si micro-morphe). Il permet ainsi de simuler des cellules solaires constituées au maximum de sept couches ayant chacune des propriétés différentes tel-que le profil de dopage, l'épaisseur, la distribution énergétique des niveaux donneurs ou accepteurs, l'absorption optique ...etc. Il calcule les bandes d'énergie, les concentrations et les courants, les caractéristiques J-V, les caractéristiques alternatives (C et G en fonction de V et / ou de f), la réponse spectrale (QE). Depuis la version 2.8, SCAPS a été adapté également pour les cellules solaires graduées [78].

III.5 Utilisation du SCAPS

Le programme est organisé en plusieurs panneaux dans lesquels l'utilisateur peut définir les paramètres ou dans lesquels les résultats sont calculés [79]. SCAPS analyse la physique du modèle et explique les profils de recombinaison, la distribution du champ électrique, le mécanisme de transport de la porteuse et les densités de courant individuelles. Le SCAPS possède trois grandes fenêtres :

III.5.1 Fenêtre d'exécution (Action Panel)

La fenêtre d'exécution « Action panel » de SCAPS est accessible dès le démarrage du logiciel. Elle est constituée de différent bloc comme le montre la figure III.26:

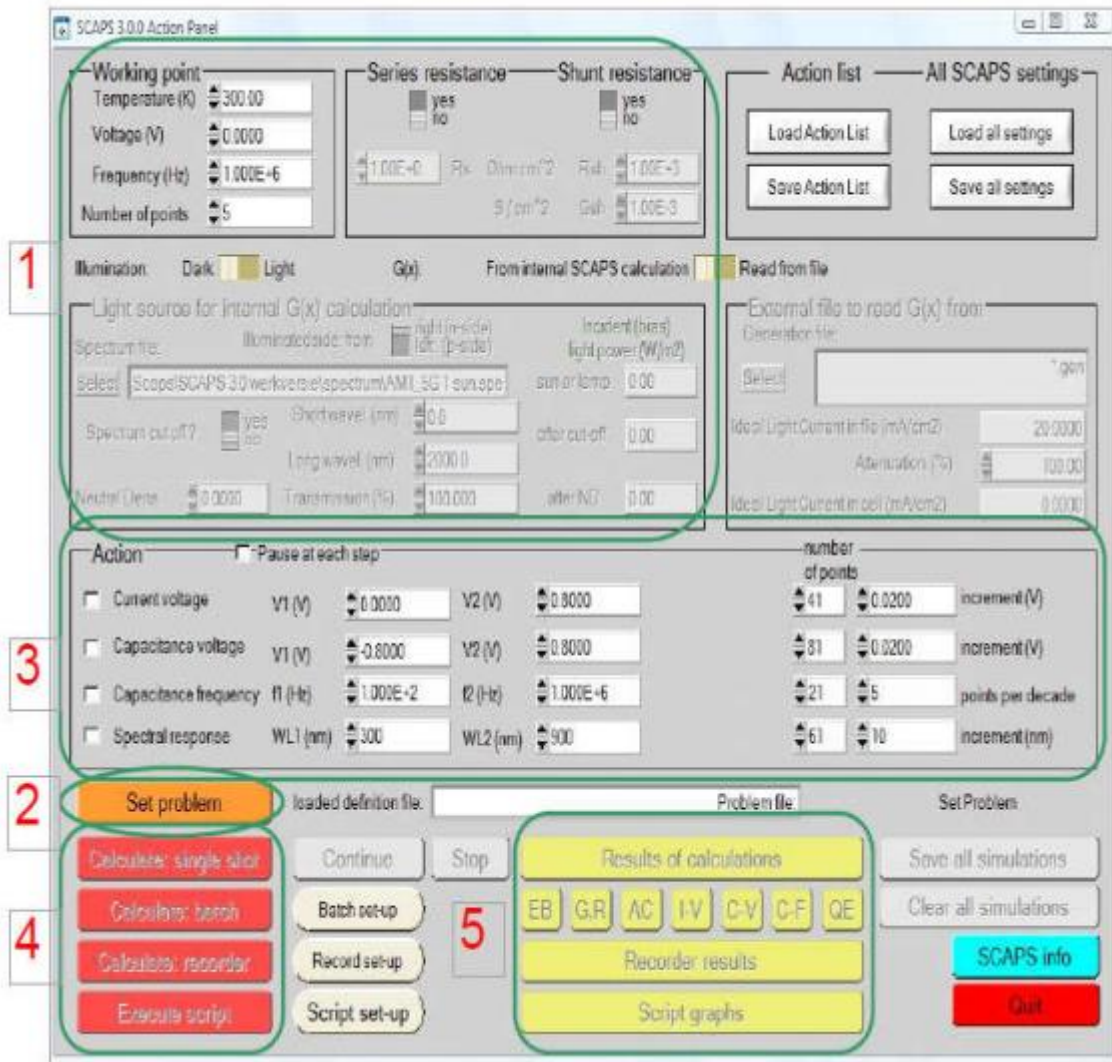


Figure III.26 : Fenêtre d'exécution « Action panel » de SCAPS.

- Bloc1 : permet la spécification des conditions de simulation :

- Spécification du point de fonctionnement (température, tension, fréquence).
- Condition d'illumination.
- Résistance.

-Bloc2 : permet de définir le problème : spécification de la géométrie, des matériaux et toutes les propriétés de la cellule solaire.

-Bloc 3 : permet de sélectionner les grandeurs simuler à savoir : la caractéristique I-V, la capacité – voltage, la capacité-fréquence et la réponse spectrale.

-Bloc 4 : permet de lancer les calculs.

-Bloc 5 : permet une visualisation des résultats.

III.5.1.1 Définir le point de fonctionnement

Le point de fonctionnement spécifie les paramètres qui ne sont pas modifiés dans une mesure de simulation et qui sont important pour cette mesure.

- la température T : importante pour toutes les mesures. Note : dans SCAPS, seulement NC (T) NV (T), les vitesses thermiques, la tension thermique kT et toutes leurs dérivés sont les seules variables qui ont une dépendance explicite de la température ; vous devez entrer pour chaque T les paramètres de matériaux correspondants.

- la tension V : est éliminée dans les simulations I-V et C-V. C'est la tension de polarisation continue dans la simulation C-f et dans la simulation QE (λ). SCAPS commence toujours à 0 V et passe à la tension du point de fonctionnement en un nombre de pas que vous devez spécifier (number of point).

- La fréquence f : est ignorée dans les simulations I-V, QE (λ) et C-f. C'est la fréquence à laquelle la mesure C-V est simulée.

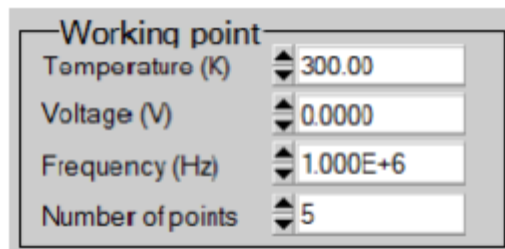


Figure III.27 : Définition du point de fonctionnement.

- L'éclairement (illumination) : est utilisé pour toutes les mesures. Pour la mesure QE (λ), il détermine les conditions de lumière de polarisation. Les réglages de base sont les suivants : sombre ou clair, choix du côté éclairé, choix du spectre. Une illumination à un soleil (= 1000 W/m²) avec le spectre global de la masse d'air 1,5 est le paramètre par défaut, mais vous disposez d'un large choix de lumière monochromatique et de spectres pour vos simulations spécialisées. Si vous disposez d'un simulateur optique, vous pouvez immédiatement charger un profil de génération au lieu d'utiliser un spectre.

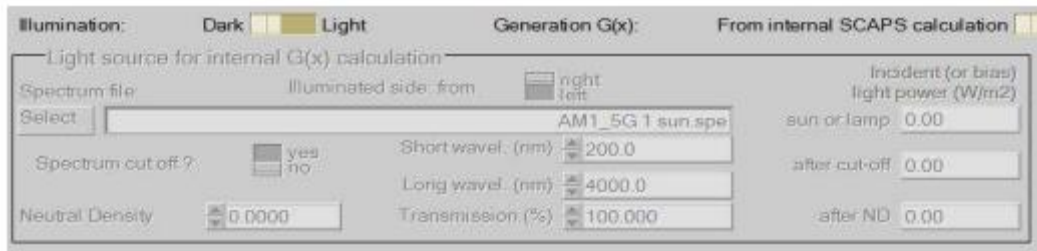


Figure III.28 : Choix de l'illumination.

III.5.2 Fenêtre de conception du dispositif (Set Problem)

Lorsque vous cliquez sur le bouton "Set Problem" dans le panneau Actions (figure III.26 bloc 2), le panneau "Solar cell definition" s'affiche (Figure III.29). Ce panneau permet de créer/éditer des structures de cellules solaires, d'afficher une fenêtre qui contient un grand nombre de données comme l'énergie de gap, la permittivité électrique, l'affinité, le dopage, et le type de dopage. En plus, les défauts de différents types peuvent être définis, à la fois, dans la masse de couches et aux interfaces. En considérant leurs états de charge et la recombinaison à leurs niveaux à savoir : le type de charge, la distribution énergétique, la propriété optique et les transitions métastables entre les niveaux, et de les sauvegarder ou de les charger à partir de fichiers de définition. Ces fichiers de définition sont des fichiers ASCII standard portant l'extension «def».

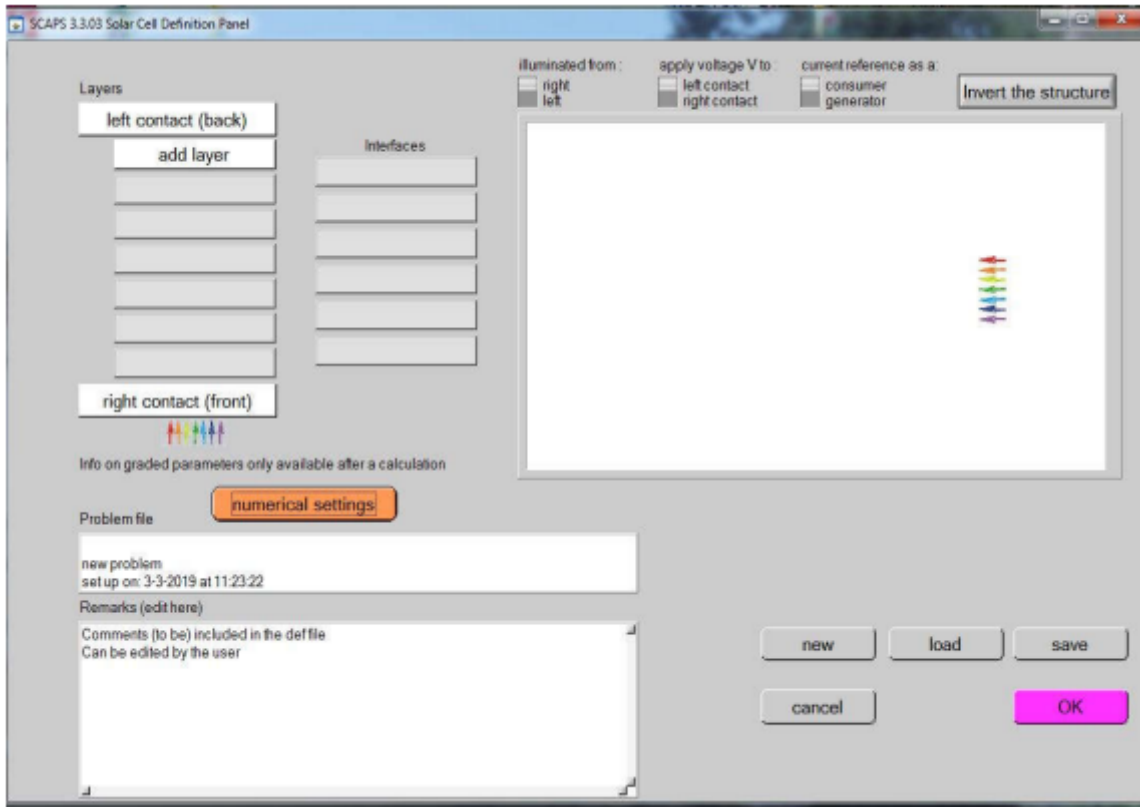


Figure III.29 : Panneau de définition de la structure.

Les propriétés des couches, de contact et d'interface peuvent être modifiées en cliquant sur la case appropriée, comme illustré à la figure III.30. De la même manière, vous pouvez ajouter des couches en cliquant sur "Add layer".

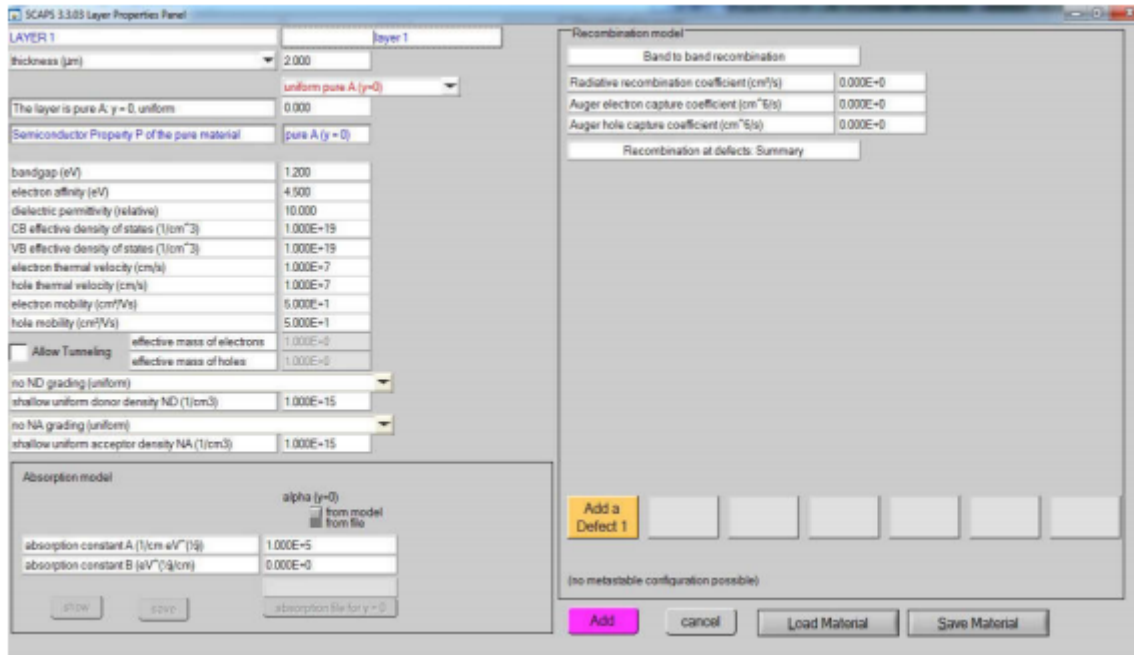


Figure III.30 : Panneaux de définition des propriétés des couches.

III.5.2.1 Défaut (Defects)

Dans SCAPS, seule la référence par défaut est utilisée : tension appliquée au contact gauche, flèche de référence actuelle de gauche à droite, donnant lieu à une référence en tant que consommateur. Dans toutes les sorties (graphiques, tableaux d'affichage/enregistrement), le résultat est affiché conformément au choix de l'utilisateur en matière de référence.



Figure III.31 : Ajouter/supprimer “defects”.

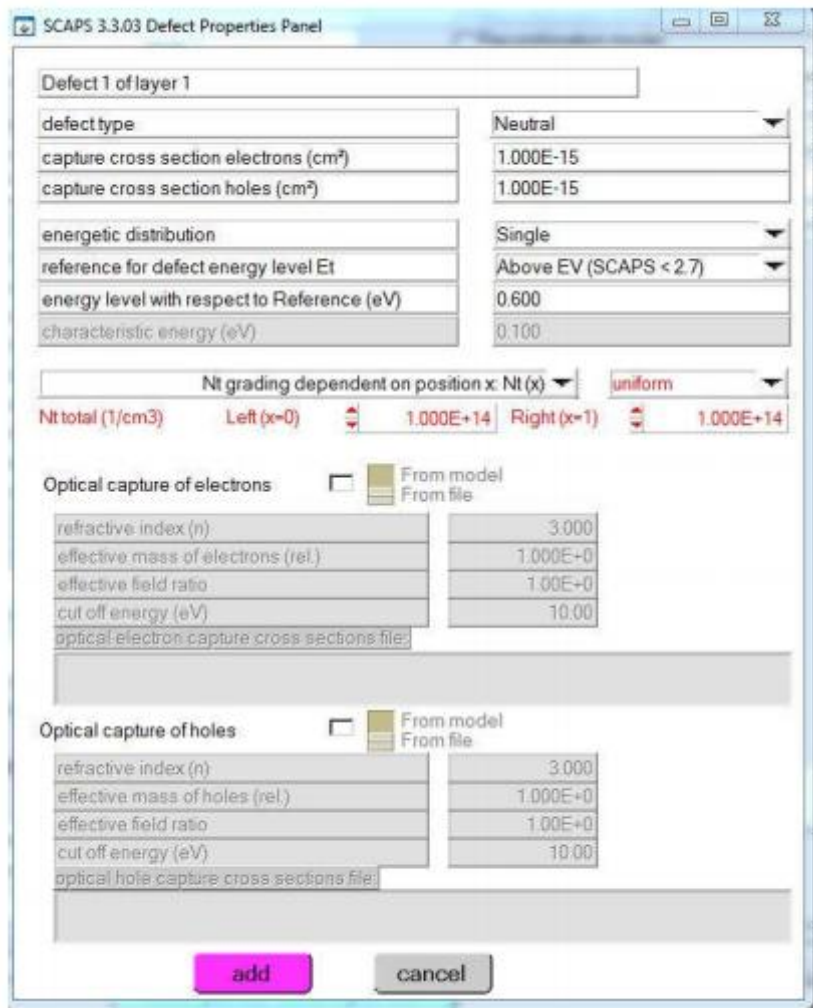


Figure III.32 : Panneaux de définition des propriétés par défaut.

III.5.2.2 Mécanisme de recombinaison

Dans SCAPS, on retrouve trois types différents de processus de recombinaison : Band-à-band (radiatif), Shockley-Read-Hall (SRH) et Auger.

-Recombinaison bande à bande : est un processus inverse à celui de l'absorption de photons. Les électrons dans la bande de conduction redescendent dans la bande de valence émettent un

photon et se recombinent avec des trous (Figure III.33.a). Le taux de recombinaison dans ce cas peut être exprimé par :

$$R = \gamma(np - n_i^2) \quad (\text{III.23})$$

-Recombinaison Auger : est un processus lors duquel une recombinaison de paire électron-trou se produit pendant la transition d'un niveau d'énergie élevé à un niveau d'énergie faible et l'énergie résultante est transmise à un troisième porteur (Figure III.33.b). Il peut être décrit par:

$$R = (c_n^A + c_p^A)(np - n_i^2) \quad (\text{III.24})$$

-Recombinaison de Shockley-Read-Hall (SRH) : également appelée recombinaison assistée par un piège (Figure III.33.c). Elle se produit en raison de défauts ou d'impuretés dans les matériaux. Le taux de recombinaison SRH est donné par :

$$R = \frac{np - n_i^2}{\tau_p(n + n_0) + \tau_n(p + p_0)} \quad (\text{III.25})$$

Où, R est le taux de recombinaison, γ est le coefficient de recombinaison, τ_n et τ_p sont respectivement les durées de vie des électrons et des trous. n_0 et p_0 sont respectivement les concentrations des électrons et des trous à l'équilibre, c_n^A et c_p^A sont des constantes, qui peuvent être définies dans SCAPS.

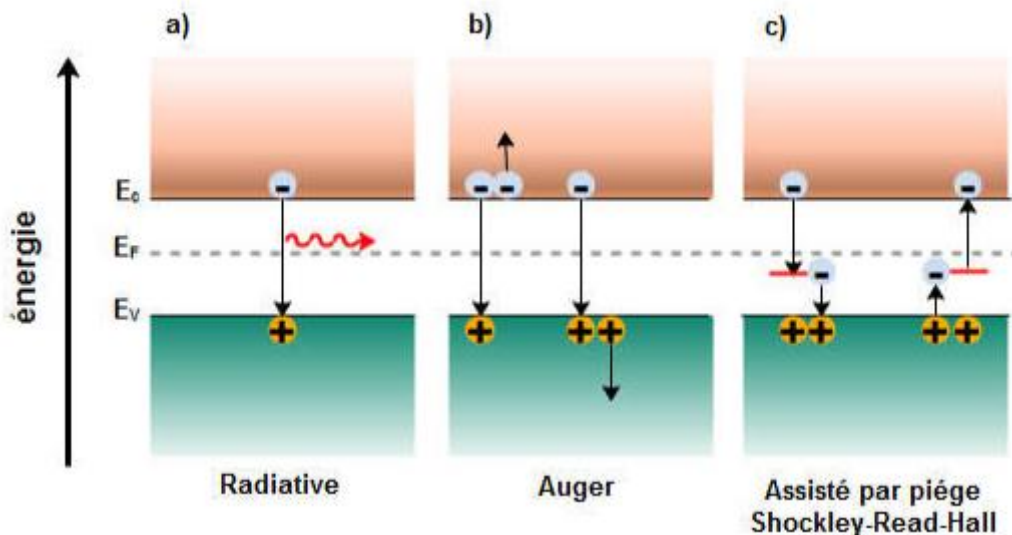


Figure III. 33 : Processus de recombinaison a) radiative, b) Auger et c) SRH.

III.5.2.3 Absorption

Le coefficient d'absorption peut être défini comme le degré d'absorption d'énergie par un matériau. Il est déterminé par la nature du matériau (Figure III.34). Dans SCAPS, le coefficient d'absorption est donné par l'équation III.26 :

$$\alpha(\lambda) = \left(A + \frac{B}{h\nu} \right) \sqrt{h\nu - E_{gap}} \quad (\text{III.26})$$

Où, A et B sont les constants d'absorption, h est la constante de Planck et V est la vitesse de la lumière [80].

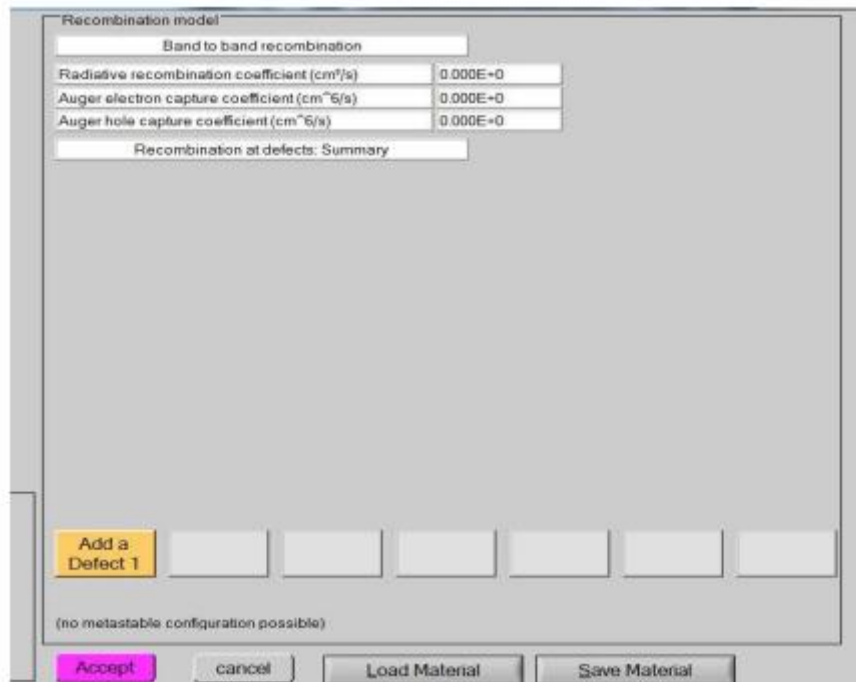


Figure III.34 : Modèle de recombinaison.

III.5.2.4 Propriété de contact

Les propriétés du contact peuvent être définies en cliquant sur le bouton de contact avant ou arrière dans le panneau de définition de cellule, ce qui ouvre le "panneau des propriétés du contact", Figure III.35.

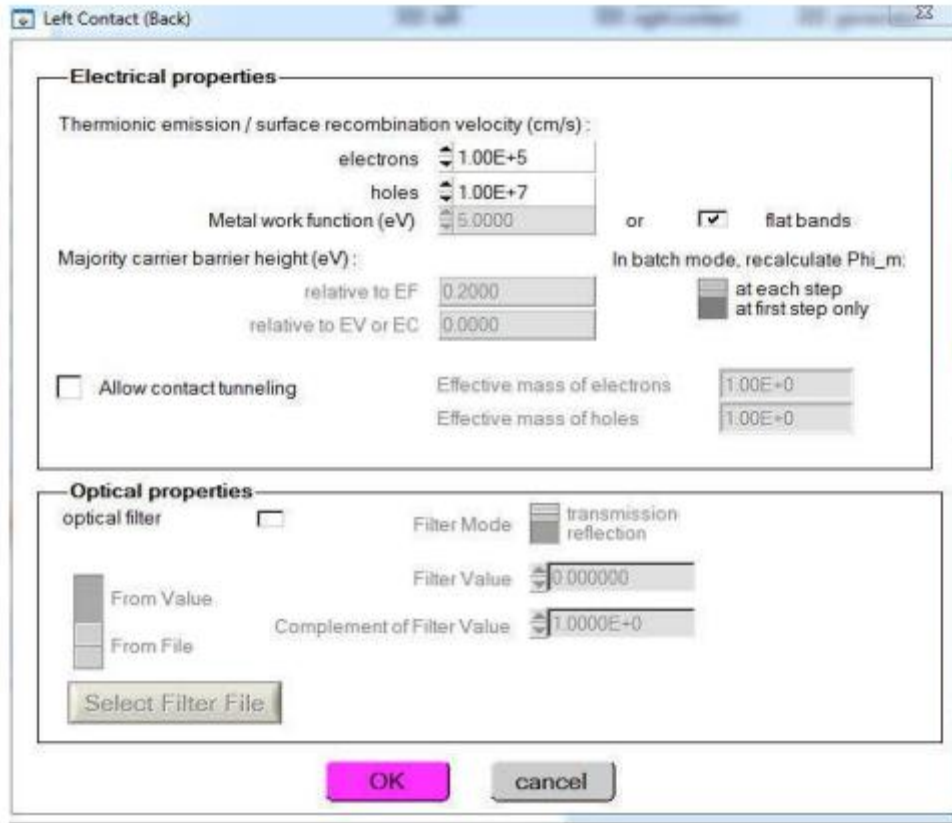


Figure III.35 : Propriétés du contact.

Le travail de sortie est l'énergie minimale requise pour déplacer un électron d'un solide vers le vide. La valeur du travail de sortie est utilisée pour décrire la force de l'énergie de liaison d'un électron dans les matériaux. Dans SCAPS, le travail de sortie peut être définie par l'utilisateur ou calculé à l'aide du modèle de SCAPS. Comme représenté dans les équations III.27, III.28 et III.29.

Contact de type-n :

$$\phi_m = \chi + K_B T \ln \left(\frac{N_c}{N_D - N_A} \right) \quad (\text{III.27})$$

Contact de type-p :

$$\phi_m = \chi + E_{gap} - K_B T \ln \left(\frac{N_c}{N_A - N_D} \right) \quad (\text{III.28})$$

Contact de type intrinsèque :

$$\phi_m = \chi + K_B T \ln \left(\frac{N_c}{n_i} \right) \quad (\text{III.29})$$

Où, ϕ_m est le travail de sortie, χ est l'affinité électronique, N_c est la densité effective d'état de la bande de conduction, N_A et N_D sont la concentration de dopage des accepteurs et des donneurs et n_i est la concentration intrinsèque.

III.5.2.5 Théorie de fonctionnement

La théorie principale de SCAPS-1D consiste à résoudre les équations de Poisson et les équations de continuité. La figure III.36 montre la stratégie de fonctionnement de SCAPS-1D. Chaque calcul commence au point départ et utilise l'hypothèse initiale, qui est exprimée en utilisant des niveaux de quasi-Fermi, pour obtenir la situation d'équilibre. Dans cette situation, aucun éclairage et tension ne sont appliqués. Lorsque le point de travail est défini dans un état sans éclairage, la condition d'équilibre est appliquée pour calculer la solution. Lorsqu'elle est réglée dans des conditions d'éclairage, la situation de court-circuit sera calculée et cette nouvelle valeur sera utilisée comme valeur initiale de l'étape suivante.

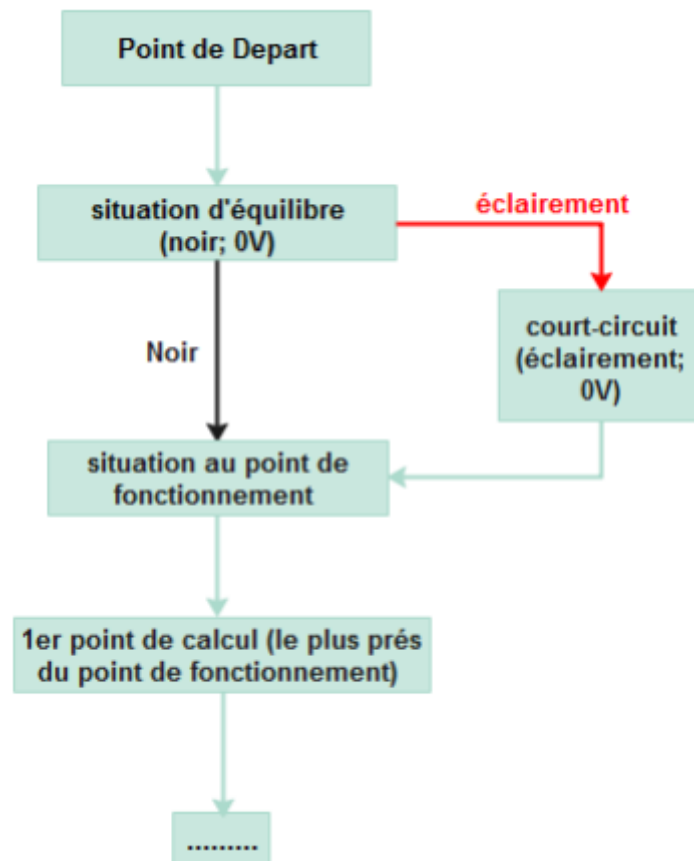


Figure III.36 : Stratégie de fonctionnement de SCAPS.

SCAPS utilise pour la convergence un schéma d'itération de type Gummel avec l'algorithme de Mewton-Raphson pour les calculs numériques. Après avoir défini un point de calcul, SCAPS suivra l'algorithme de Newton-Raphson pour effectuer le calcul d'itération jusqu'à l'obtention de la valeur d'optimisation.

III.5.3 Fenêtre de résultat

Cette fenêtre affiche les résultats de la simulation sous forme de graphe avec la possibilité de les sauvegarder ou exporter leurs valeurs. SCAPS est capable de calculer les bandes d'énergie, les concentrations et les courants à un point de fonctionnement donné (Figure.III.37), les caractéristiques (I-V), les caractéristiques (C-V) et (C-f), le rendement quantique (QE), et les bandes d'énergies en régime alternatif (ac-bands).

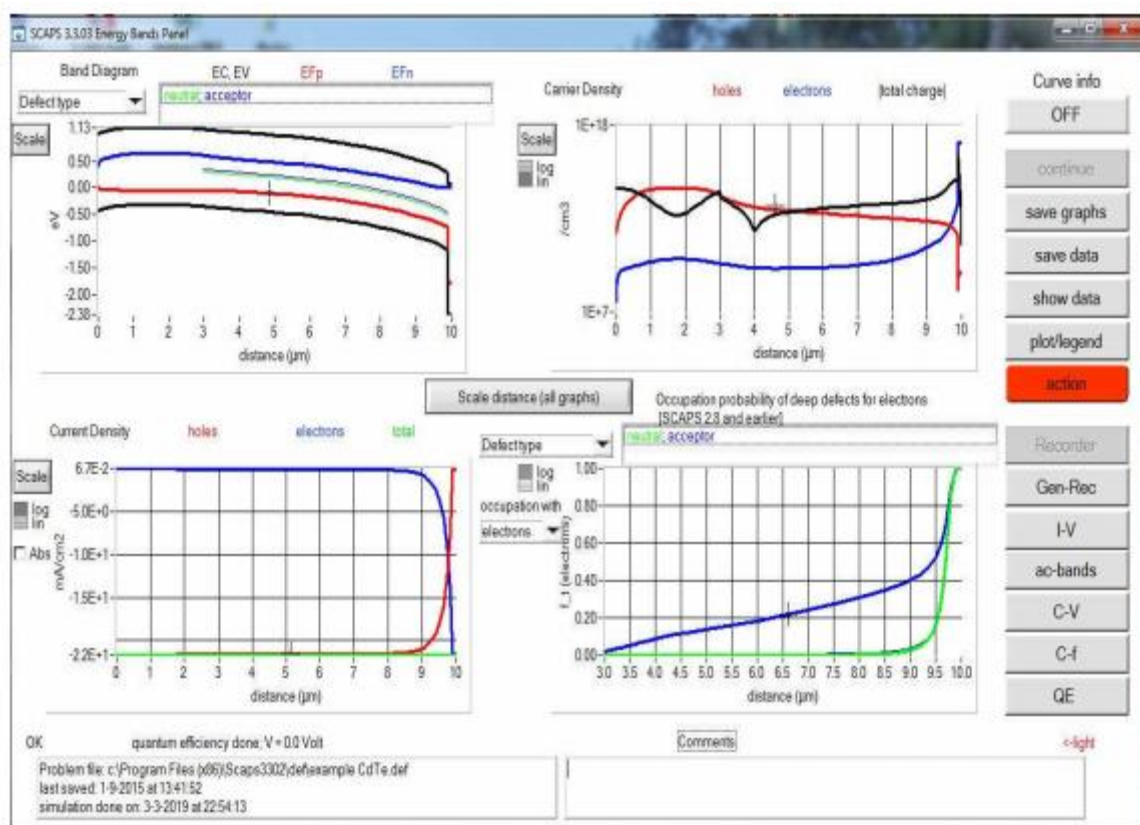


Figure III.37 : Panneau d'affichage des résultats de bande d'énergie, courant et concentration.

III.5.3.1 Panneau I-V (I-V panel)

Les résultats des simulations courant-tension sont représentés sur le panneau IV « IV panel ». Le graphique de gauche affiche toutes les simulations I-V. Le graphique de droite fournit des informations détaillées sur les courants de recombinaison dans la dernière simulation. Cela

permet de voir le mécanisme de recombinaison principal dans la structure pour des tensions variables. Si la simulation est effectuée sous illumination, les paramètres de la cellule solaire sont calculés et affichés (Figure III.38).

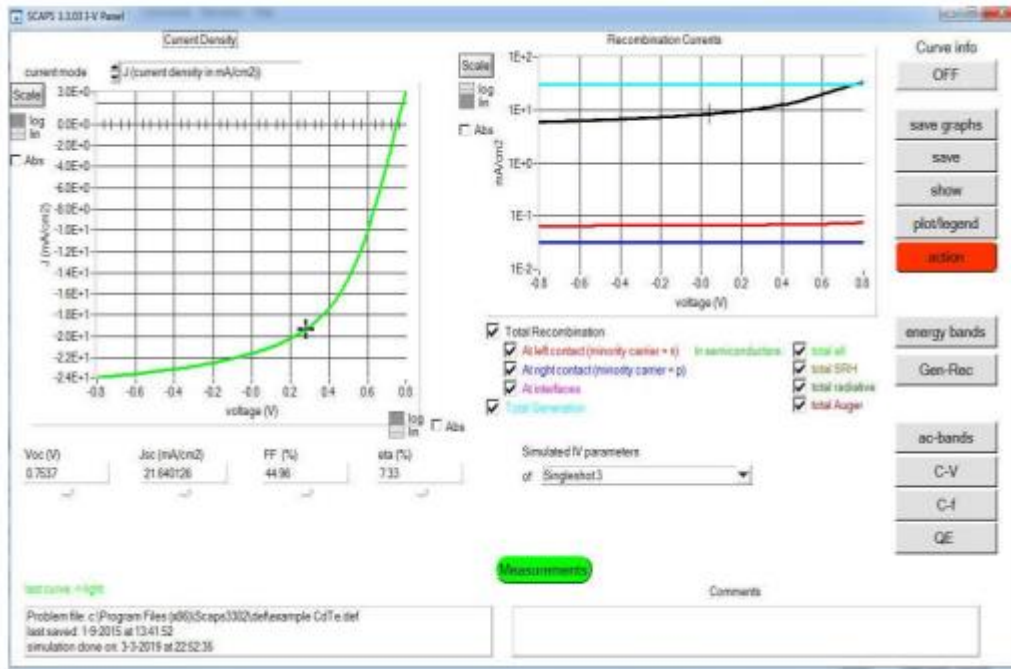


Figure III.38 : Panneau I-V avec visualisation des paramètres de la cellule.

III.5.3.2 Panneau QE (QE-panel)

Comme le montre la figure III.39, ce panneau permet d'analyser les simulations du rendement quantique. Sur l'axe horizontal, il est possible d'afficher la longueur d'onde ou l'énergie photonique de la lumière monochrome. Sur l'axe vertical on a plusieurs possibilités (Figure III.40).

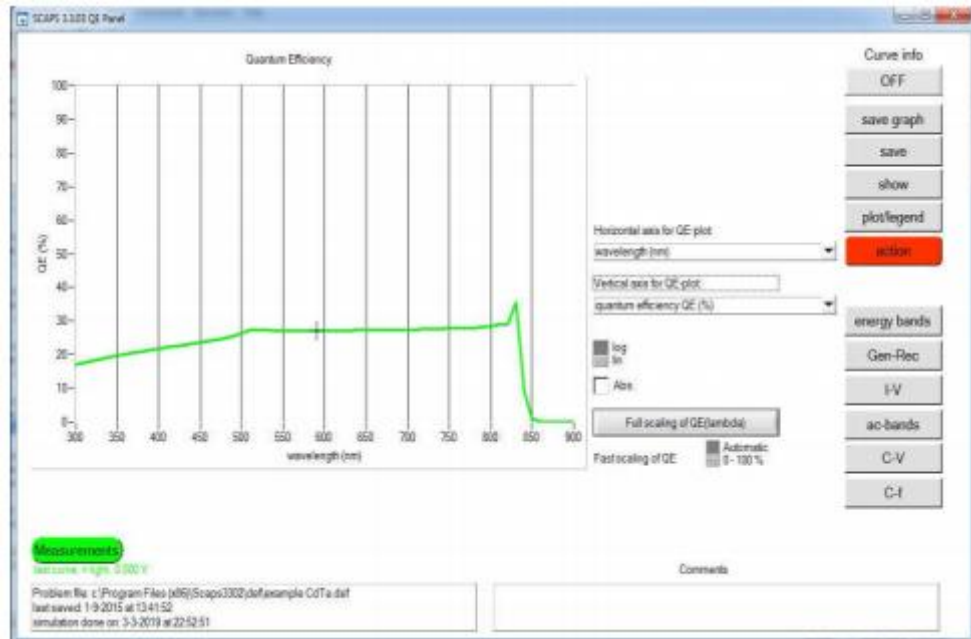


Figure III.39 : Panneau du rendement quantique.

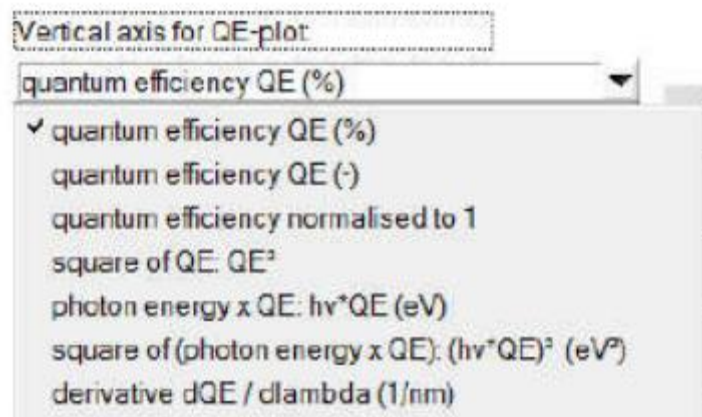


Figure III.40 : Les choix possibles du panneau de rendement quantique QE.

III.6 Avantages et inconvénients du SCAPS

SCPAS offre plusieurs avantages : une grande vitesse d'exécution, des fichiers d'entrée accessible aux utilisateurs en format texte (donnée spectrale, paramétré de description du dispositif), la possibilité d'introduire des interfaces et la prise en compte des phénomènes de recombinaison, la possibilité d'introduire les résistances séries et parallèles et permet de visualiser les caractéristiques capacité-tension et capacité fréquence. Néanmoins, ses inconvénients impliquent l'absence de la gestion du phénomène de réflexion aux interfaces des différentes couches constituant la cellule solaire [8].

III.7 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté le modèle de la cellule solaire afin d'optimiser les paramètres, géométriques, physiques, électriques et optiques. Nous avons établi la génération de la recombinaison dans les différentes régions de la cellule solaire et le modèle de calcul des courants. Puis nous avons donné un aperçu sur les logiciels de simulation utilisés dans la conception et la simulation des cellules solaires. Enfin, nous avons terminé ce chapitre par une description détaillée du simulateur SCAPS-1D qui sera considéré comme l'outil de simulation principal dans notre travail. L'utilisation de logiciel SCAPS est très pratique et très utilisable par la communauté scientifique depuis sa mise en service. Les différentes étapes que nous avons décrit dans ce paragraphe nous a permis de bien comprendre le fonctionnement du logiciel.

Chapitre IV : Application

IV.1 Introduction

L'inconvénient majeur qui gêne jusqu'à présent l'exploitation de l'énergie solaire photovoltaïque est le coût des panneaux solaires. C'est pourquoi, le principal objectif des chercheurs à travers le monde est d'améliorer le rendement de conversion de la cellule solaire ainsi que diminuer leur coût de fabrication. Pour cela, il sera intéressant d'utiliser un minimum de quantité du matériau absorbeur de la cellule, ce qui exige un matériau possédant un large coefficient d'absorption et une excellente mobilité des porteurs. Les performances des cellules solaires augmentent lorsque la jonction est adaptée au spectre solaire en augmentant la largeur de bande interdite. Parmi ces absorbeurs, les chalcopyrites CIS (I-III-VI) et CIGS est un matériau de type (I-III-VI₂), de structure chalcopyrite très prometteur pour la conversion photovoltaïque. Ces matériaux ont l'avantage d'avoir une largeur de bande interdite ajustable, et une excellente stabilité électrique et thermique et excellente sous les conditions d'opérations c.-à-d. excellente résistance aux irradiations.



Figure IV.41 : Structure de la cellule solaire au CIGS ou CZTSSe.

Pour diminuer à la fois le poids et le prix de ces dispositifs tout en augmentant leurs surfaces et leurs souplesses, des cellules en couches minces ont été réalisés. Les cellules solaires en couches minces qui utilisent le diséléniure de cuivre et d'indium CuInSe_2 , représentent l'approche la plus prometteuse au plan de réduction des coûts de production. Il a fait preuve de lui l'un des matériaux qui contribueront fortement au potentiel énergétique solaire du futur. Dans le but d'optimiser une conception spécifique d'une d'hétérojonction ZnO

(n)/CdS(n)/CIS(p), Le choix convenable des matériaux photo-actifs et qualité des électrodes métalliques est nécessaire pour obtenir un bon rendement de conversion. Dans ce chapitre nous intéresserons d'améliorer la performance de la cellule solaire à base le matériau original CuInSe₂ (CIS), très attractif et à fort potentiel. Nous allons étudier les effets majeurs qui influent sur les performances de la cellule solaire tels que la variation de l'épaisseur de la couche d'absorbeur, et additionner des défauts.

IV.2 Amélioration de la performance des cellules solaires chalcopyrites

Les semi-conducteurs chalcopyrites sont devenus des matériaux prometteurs à faible coût, non toxiques et à haut rendement pour les applications photovoltaïques (PV). Des matériaux chalcopyrites CIGS et CIS, ont été utilisés pour fabriquer des cellules solaires à couche mince. En outre, de nouvelles cellules solaires à film mince semi-conductrices basées sur les alliages ternaires CIS et les alliages quaternaires CIGS ont attiré une attention considérable des chercheurs dans le domaine de la technologie photovoltaïque en raison de leur bande interdite appropriée variant de 1,035 à 1,68 eV avec un bon coefficient d'absorption. Le succès de ces alliages s'explique avant tout par le fait que l'énergie de leur bande interdite peut être modélisée selon nos désirs (à l'intérieur des limites intrinsèques des matériaux choisis) en développant des alliages de semi-conducteurs dérivés des composés dont les propriétés sont connues. C'est ce qu'on appelle l'ingénierie des bandes interdites.

IV.2.1 Choix et sélections des matériaux

Pour qu'un semi-conducteur soit efficace en cellule photovoltaïque, sa bande interdite doit être optimale pour utiliser la majorité des rayonnements. Un grand nombre de matériaux ont été investigués dans la littérature. Certains éléments ont des bandes interdites élevées ($> 2,5$ eV) et ne peuvent absorber que les photons à de basses longueurs d'ondes ; et il y aura donc une perte d'une quantité importante du rayonnement solaire. Les composés ternaires forment une partie de cette étude, en particulier les composés chalcopyrites, parmi ces composés le CuInSe₂ apparaît comme un candidat prometteur. L'intérêt de ce matériau repose sur des facteurs principaux :

-Une valeur suffisante d'énergie de gap directe ($E_g=1.15$) pour la réalisation des hétérojonctions et un coefficient d'absorption élevé dans les différentes régions de spectre solaire.

-Il présente des paramètres de maille et une affinité électronique compatibles avec ceux des matériaux utilisés dans la fabrication des autres couches constituant la cellule solaire à savoir le CdS, ITO, ZnO, etc.

-La possibilité de synthèse et d'élaboration de matériaux semi-conducteurs par plusieurs techniques et sur différents types de substrat.

-La possibilité d'obtenir un matériau de type n ou p, permettant la fabrication de L'homojonction ou hétérojonction.

-Une bonne accommodation du réseau avec CdS et (CdZn) S, permet de réduire les états d'interface.

IV.2.2 Synthèse et élaboration des matériaux

Par définition, Une couche mince ou TF (Thin Film) est un revêtement dont l'épaisseur peut varier de quelques couches atomiques à une dizaine de micromètres. Cette technologie des cellules solaires ne dépose que la quantité de matériau photosensible capable d'absorber l'essentiel du rayonnement solaire (quelques microns d'épaisseurs suffisent), ce qui rend ces cellules peu gourmandes en matériaux de fabrication et facilement adaptables aux supports flexibles.

Bien que ces cellules solaires à couche mince aient un avantage concurrentiel sur les cellules solaires de première génération en raison de leurs coûts plus bas et de leurs rendements élevés, elles présentent ainsi certains inconvénients. La plupart des matériaux qui composent ces cellules sont à la fois de plus en plus rares et de plus en plus coûteux (indium) ou hautement toxiques (cadmium) [81], [82].

• Techniques de dépôt des couches minces.

Les principales méthodes utilisées pour fabriquer des couches minces font appel à la technique de dépôt en phase vapeur chimique (CVD : Chemical Vapor Deposition) [83] et de dépôt en phase vapeur physique (PVD : Physical Vapor Deposition [84]. La classification des méthodes est présentée sur le schéma de la figure IV.42. Des techniques de synthèse alternatives, comme ont également été favorisées car elles diminuent de façon significative les températures de synthèse nécessaires.

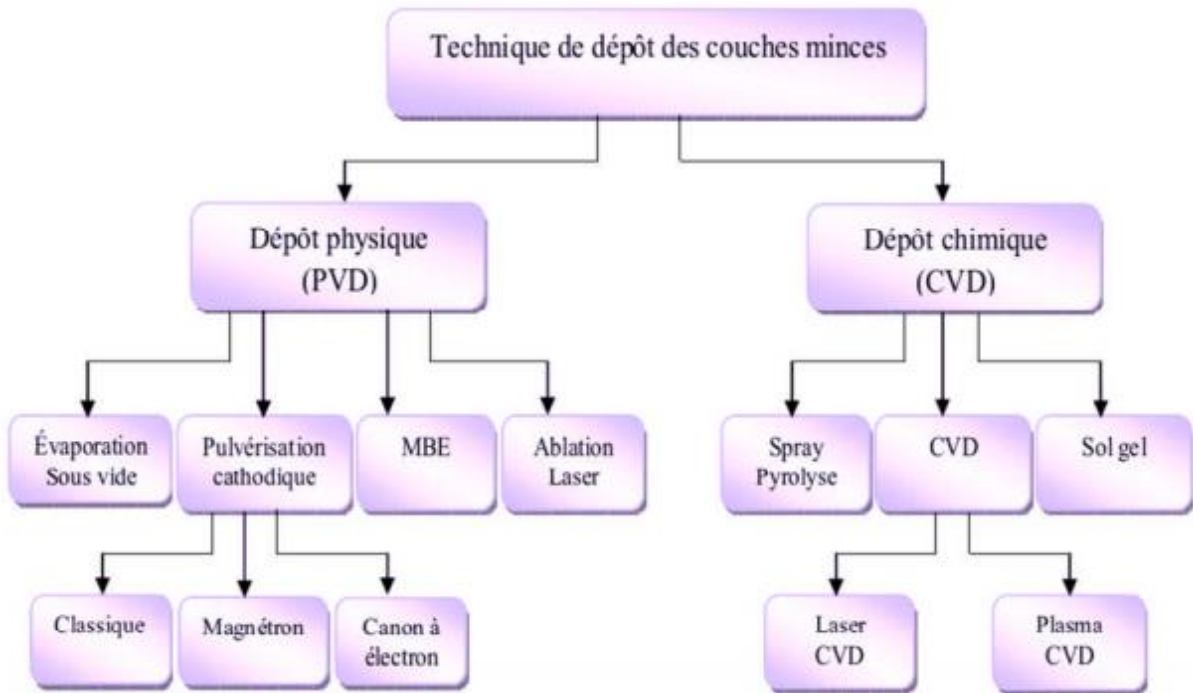


Figure IV.42 : Techniques de dépôt des couches minces [85].

IV.3 Description des cellules solaires à base chalcopyrites

Une cellule solaire à base de CIS est constituée principalement de trois composants disposés en couches minces et deux contacts métalliques comme le montre la figure IV.43:

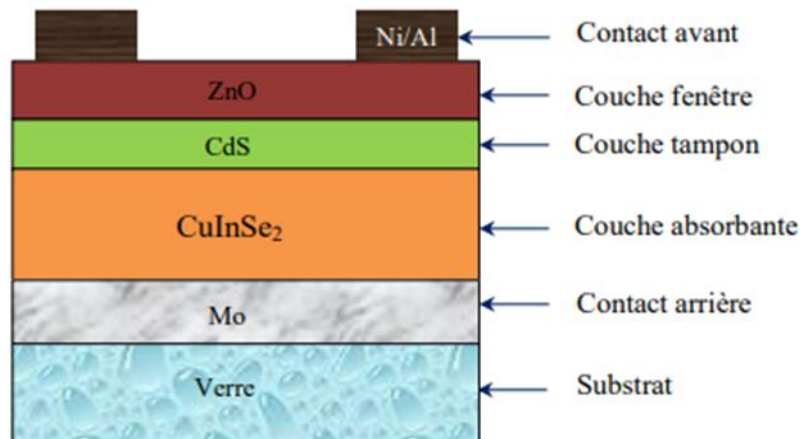


Figure IV.43 : Schéma représentatif d'un empilement d'une cellule solaire à base de CuInSe₂.

-
- Un substrat
 - Deux contacts avant et arrière sur les deux faces du système
 - Une couche absorbante avec une conduction de type P
 - Une couche tampon avec une conduction de type N
 - Une couche fenêtre

Notons que, dans des cas particuliers, une couche anti-réfléchissante en MgF₂ est ajoutée. Dans ce qui suit, on va aborder en détail les différents constituants d'un empilement d'une cellule solaire [86]. Le schéma simplifié de l'hétéro-structure est représenté sur la figure (IV.43). Les contacts métalliques sont fixés en haut et en bas et ils sont caractérisés par leur travail de sortie et la vitesse de recombinaison en surface

IV.4 Etude numérique des paramètres de la cellule solaire chalcopyrite

La modélisation d'une cellule solaire est l'outil performant qui nous permettra de lier les caractéristiques de cette cellule avec les propriétés du matériau et la technologie de fabrication afin d'améliorer les performances de la cellule. L'objectif de cette présente thèse est de faire une modélisation d'une cellule solaire en couche mince de structure P-N à base de CuInSe₂ en vue d'optimiser par simulation les caractéristiques physiques et géométriques des différentes couches de la cellule. Nous avons choisis le modèle pour calculer les caractéristiques de la cellule solaire (ZnO (n) / CdS (n) / CIS (p)) un ensemble de paramètres a été construit à partir de la littérature et donné dans les tableaux suivant IV.3 et IV.4 insérés dans le simulateur des cellules solaires SCAPS-1D.

Tableaux IV.3 : Principaux paramètre des matériaux utilisé.

| Thin Layers | n-ZnO | n-CdS | p-CIS |
|---|--------------|--------------|--------------|
| Bande de gap (eV) | 3.40 | 2.40 | 1.15 |
| Electron affinity χ_e (eV) | 4.55 | 4.50 | 4.15 |
| Dielectric permittivity (relative ϵ_r) (F.cm ⁻¹) | 10 | 10 | 13.6 |
| Electron mobility (cm ² /V.s) | 100 | 100 | 100 |
| Hole mobility (cm ² /V.s) | 25 | 25 | 25 |
| CB effective density of states (Nc (cm ⁻³)) | 4E18 | 2.2E18 | 2.2E18 |
| VB effective density of states (Nv (cm ⁻³)) | 9E18 | 1.8E19 | 1.9E19 |
| Shallow uniform donor Density (ND (cm ⁻³)) | 1E17 | 1.1E18 | - |
| Shallow uniform acceptor Density (NA (cm ⁻³)) | - | - | 2E16 |
| Thickness (μm) | 0.05 | 0.025 | 0.3 |

Le tableau (IV.3) résume les différentes valeurs des paramètres de chaque couche constituant notre cellule, notant que l'épaisseur de la couche absorbante a été fixé après les calculs de l'épaisseur optimale de la couche absorbante qui assure le meilleur rendement. Les défauts de la couche fenêtre ZnO et tampon CdS sont fixé sur le tableau IV.4.

Tableau IV.4 : Etat des défauts pour différentes couches de la cellule.

| Defect Thin Layer | n-CdS | n-ZnO |
|---|--------------------------|---------------------------|
| Defect type | Neutral | Neutral |
| Capture cross section electrons (cm²) | 1E(-12) | 1E(-12) |
| Capture cross section holes (cm²) | 1E(-12) | 1E(-12) |
| Energetic distribution | Single | Gaussienne |
| Reference for defect energy level Et | Above Ev (Scaps <2.7) | Above Ev (Scaps < 2.7) |
| Energy level with respect to Reference (eV) | 0.60 | 1.65 |
| Characteristic energy (eV) | - | 0.10 |
| Nt grading depending on position x: Nt | Uniform | Uniform |
| Nt total (1/cm³) Left | 1E18 | 1.772E16 |
| Nt total (1/cm³) Right | 1E18 | 1.772E16 |
| Nt peak (1/eV/cm³) Left | - | 9.997E16 |
| Nt peak (1/eV/cm³) Right | - | 9.997E16 |

IV.5 Etude théorique et prédictive sur les performances des Chalcopyrites

Ces cellules sont à base des matériaux semi-conducteurs inorganiques. L'objectif de la simulation des cellules solaires est de trouver un lien entre les propriétés des matériaux et les caractéristiques électriques de la cellule solaire. Nous présentons l'étude des caractéristiques électriques de la cellule solaire à hétérojonction (ZnO (n)/CdS (n) /CIS (p)) en couches minces. Où le semiconducteur CuInSe₂ (CIS) de type p qui est l'absorbeur de la cellule. On a étudié l'influence des différents paramètres pour chaque couche de la cellule afin d'améliorer le rendement de conversion η (%), la densité de courant de court-circuit J_{sc} , la tension en circuit ouvert V_{oc} , le facteur de forme FF (%) et la réponse spectrale QE. On va obtenir tout cela à partir le simulateur SCAPS-1D pour générer les résultats des caractéristiques électriques de la cellule étudiée et leurs discussions.

IV.5.1. Effet de l'épaisseur de couche absorbeur sur les performances des Chalcopyrites

De nombreuses études expérimentales et théoriques basées sur les semiconducteurs à base de chalcopyrite ont été réalisées afin d'améliorer les rendements de conversion. Il a été démontré, par exemple, qu'une réduction de l'épaisseur des absorbants chalcopyrite CIS pouvait permettre de réduire les coûts de fabrication des cellules solaires à couche mince et d'améliorer les rendements solaires. De ce fait, des couches minces à base de couches d'absorbants chalcopyrites CIS ultra-minces ont récemment été fabriquées, afin d'obtenir des rendements moyens élevés pour les cellules solaires. L'épaisseur de l'absorbeur de chalcopyrite est l'un des paramètres importants contribuant à optimiser les performances de la cellule solaire.

Dans les dispositifs à cellules solaires chalcopyrites, l'absorbeur joue un rôle crucial dans les performances des cellules, qui est composé d'un matériau photo-absorbant de type chalcopyrites à base de CIS. Des densités de défauts élevées dans le matériau de la couche absorbante pourraient limiter les caractéristiques de performance des cellules solaires, car les défauts peuvent dégrader la qualité des matériaux des couches et induisent une recombinaison des supports et une réduction de la durée de vie, pour assurer le meilleur transport des porteurs en réduisant leurs recombinaisons et diffusion au niveau du contact arrière. On a choisi quelques valeurs de l'épaisseur de la couche absorbeur CIS pour simuler la variation des paramètres photovoltaïques de la cellule solaire.

Tableau. IV.5 : Effet de l'épaisseur de la couche absorbeur CIS sur les caractéristiques électriques de la cellule solaire.

| Thickness (nm) | V_{oc} (v) | J_{sc} (mA/cm ²) | FF (%) | Efficiency (%) |
|----------------|--------------|--------------------------------|--------|----------------|
| 100 | 0.5553 | 20.239308 | 68.21 | 7.67 |
| 200 | 0.5910 | 28.742553 | 66.62 | 11.32 |
| 300 | 0.6078 | 32.301692 | 68.83 | 13.51 |
| 400 | 0.6180 | 34.255237 | 71.05 | 15.04 |
| 500 | 0.6265 | 35.556436 | 72.64 | 16.18 |
| 600 | 0.6325 | 36.499181 | 73.92 | 17.07 |
| 700 | 0.6372 | 37.214710 | 74.96 | 17.78 |
| 800 | 0.6416 | 37.778028 | 75.75 | 18.36 |
| 900 | 0.6458 | 38.231010 | 76.42 | 18.87 |
| 1000 | 0.6491 | 38.609132 | 76.98 | 19.29 |
| 1100 | 0.6506 | 38.922240 | 77.62 | 19.66 |
| 1200 | 0.6533 | 39.194545 | 78.00 | 19.97 |
| 1300 | 0.6558 | 39.425892 | 78.28 | 20.24 |

La performance des cellules solaires dépend de la réponse du spectre solaire. L'épaisseur de la couche d'absorbeur est un paramètre important et joue un rôle essentiel dans l'optimisation des performances de la cellule solaire. Les paramètres de performance de la cellule solaire sont simulés en fonction de variation de l'épaisseur de la couche d'absorbeur CIS. Les courbes résultantes V_{oc} , J_{sc} , FF et du rendement η sont représentées sur la Figure IV.44. L'épaisseur de CIS a été variée de 100 nm à 1300 nm ainsi que l'énergie de la bande interdite (E_g) de 1,15 eV.

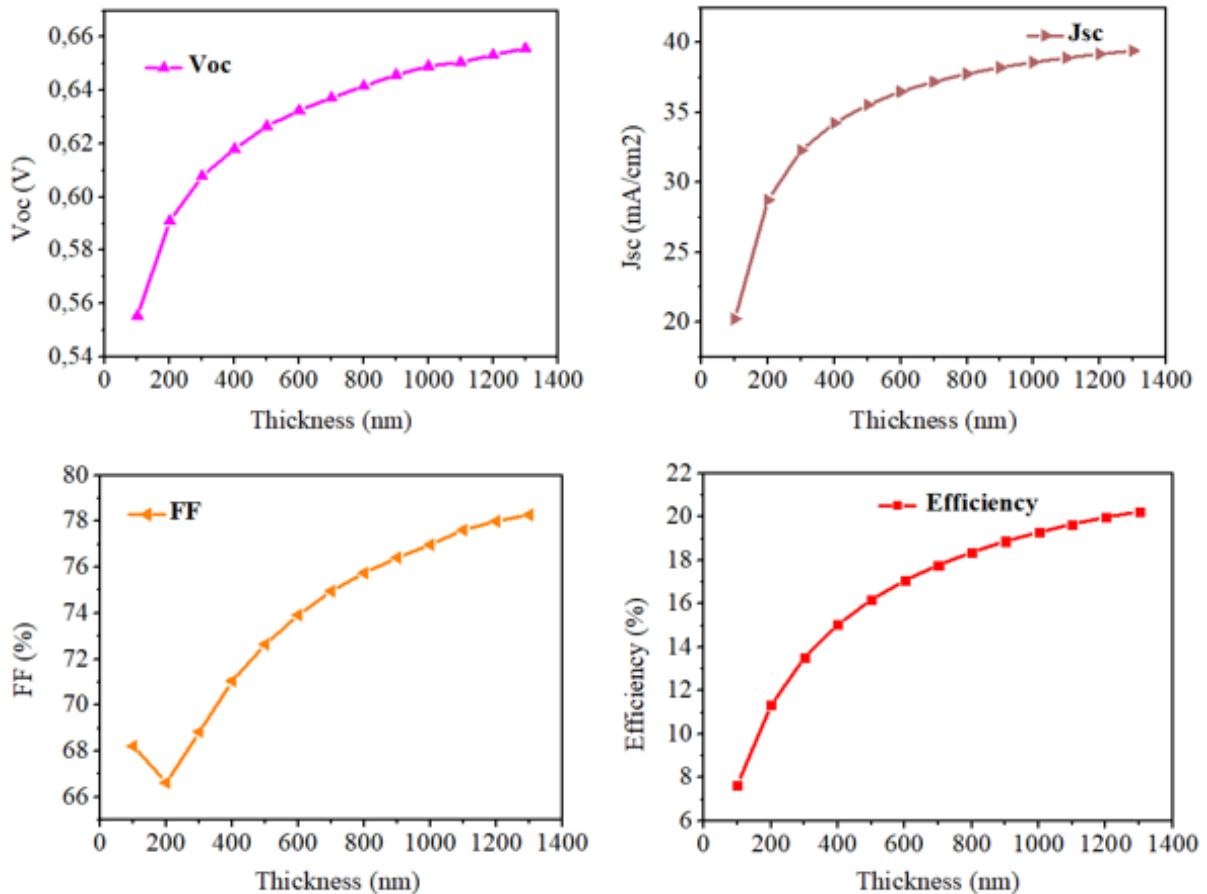


Figure IV. 44 : Simulation des performances de la cellules solaire de CIS en fonction de variation de l'épaisseur de l'absorbeur sur V_{oc} ; J_{sc} ; FF ; rendement.

Pour le CIS, Les valeurs optimisées des performances ont été reporté dans le tableau IV.3. La Figure IV.44 montre une augmentation de V_{oc} de 0.55 V à 0.65 V lorsque l'épaisseur passe de 100 nm à 1300 nm., le J_{sc} calculé augmente avec l'augmentation de l'épaisseur et atteint une valeur maximale 39.42 mA/cm². Le facteur de forme commence à diminuer lorsque l'épaisseur de l'absorbeur est inférieure à 200 nm, ensuite avec L'augmentation de l'épaisseur de l'absorbeur dépassé de 200 nm entraîne une amélioration considérable du facteur de forme FF de 68.83 % à 78.28 %. Enfin, du rendement η maximal de 20.24% avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche CIS. En effet, une bonne optimisation des performances des dispositifs photovoltaïques. Il est évident d'observer la grande influence de l'épaisseur de la couche d'absorbeur sur le rendement. La cellule peut atteindre des valeurs très élevées de J_{sc} et le rendement dans un absorbeur mince à partir de 500 nm (voir figure IV.44). On peut en conclure qu'une couche absorbante de 1300 nm d'épaisseur peut être considéré comme étant optimale pour obtenir un meilleur rendement. Ceci pourrait être dû au fait que plus de photons avec de grandes longueurs d'onde sont absorbés par l'absorbeur davantage de concentration des porteurs photo-générés en

excès avec une longueur d'onde plus longue, ce qui favoriserait la génération de paires électron-trou.

IV.5.2 Effet de l'épaisseur de la couche fenêtre ZnO sur les performances des Chalcopyrites

Le premier contact entre les photons et la cellule solaire, est la couche fenêtre ZnO. L'augmentation de celle-ci influe sur la création des paires électron-trou, d'où la diminution du rendement. En outre, quand la couche ZnO est très épaisse, la performance de cellules se dégrade en raison d'une part de l'augmentation de la résistance en série (augmentation des pertes), et d'autre part de l'épaisseur de la couche. Plus l'épaisseur diminue, plus l'absorption augmente (pour les longues longueurs d'onde). Par conséquent une épaisseur optimale de la couche ZnO est nécessaire pour la meilleure performance de la cellule solaire.

Cette couche est caractérisée par un gap optique élève presque de 3.40 eV. Les paramètres de la structure, pour différentes épaisseurs de couche ZnO, tirés des différentes caractéristiques électriques, sont résumés dans le tableau (IV.6) tandis que les épaisseurs des couches en CdS et en CIS sont fixées (25 nm, 300 nm respectivement). L'utilisation d'une couche fenêtre dans le processus de fabrication d'une cellule solaire est un élément important pour optimiser le rendement de la cellule photovoltaïque, il faut bien choisir le matériau de cette couche. Le matériau le plus approprié à notre cellule est ZnO pour minimiser la réflexion de la lumière. Leur transparence est liée à la valeur de leur bande interdite, et conductrice, de façons à collecter les électrons tout en laissant passer la lumière tandis que leurs propriétés électriques dépendent de la composition des couches et d'un éventuel dopage. Les figures IV.45 représentent respectivement la caractéristique J (V) de la cellule photovoltaïque pour différentes épaisseurs de la couche fenêtre ZnO.

Tableau IV.6 : Effet de variations de l'épaisseur de la couche fenêtre ZnO sur les caractéristiques électriques de la cellule PV à base de CIS.

| Thickness (nm) | V_{oc} (v) | J_{sc} (mA/cm ²) | FF (%) | Efficiency (%) |
|----------------|--------------|--------------------------------|--------|----------------|
| 10 | 0.6078 | 32.335756 | 68.83 | 13.53 |
| 20 | 0.6078 | 32.326728 | 68.83 | 13.52 |
| 30 | 0.6078 | 32.317962 | 68.83 | 13.52 |
| 40 | 0.6078 | 32.309605 | 68.83 | 13.52 |
| 50 | 0.6078 | 32.301692 | 68.83 | 13.51 |
| 60 | 0.6078 | 32.294210 | 68.83 | 13.51 |
| 70 | 0.6078 | 32.287128 | 68.82 | 13.51 |

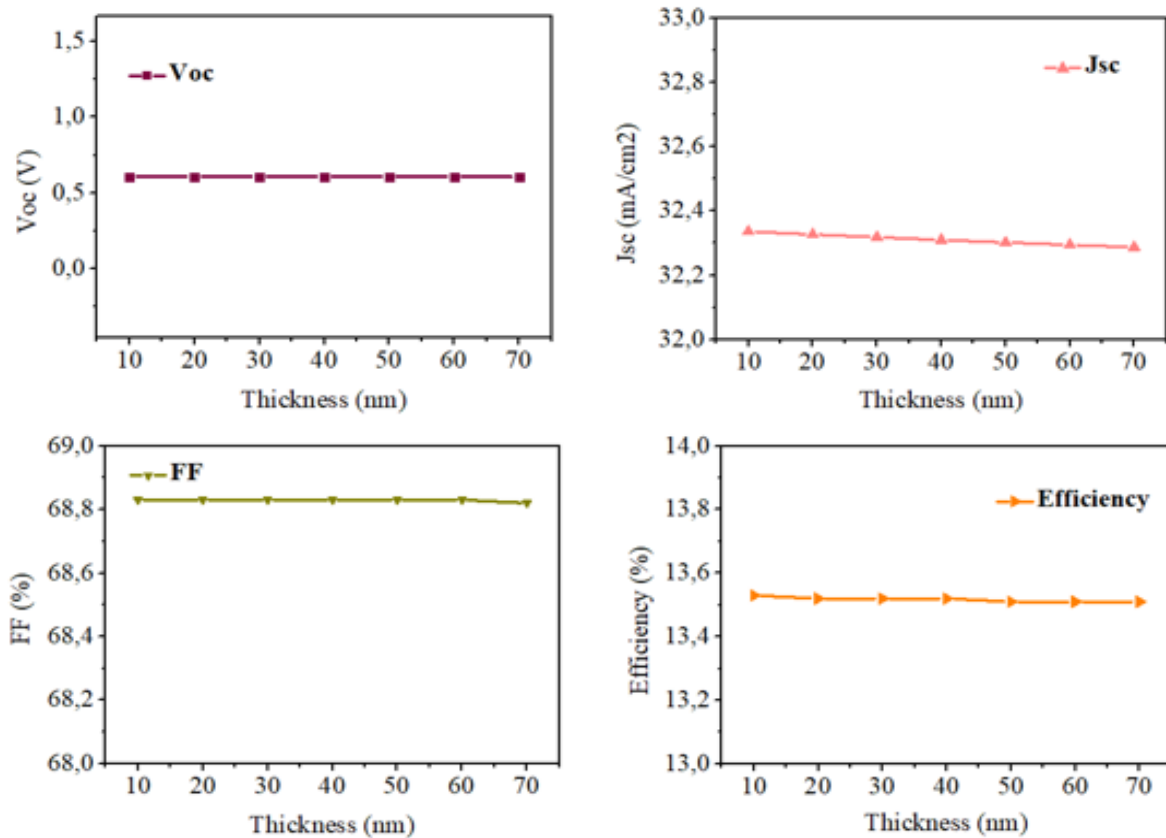


Figure IV.45 : Variation des performances de la cellule solaire chalcopyrite en fonction de variation de l'épaisseur de la couche fenêtre ZnO. V_{oc} et J_{sc} , FF et rendement.

A partir des résultats par la simulation numérique que nous représentons dans le tableau (IV.6) et dans les figures (IV.45) Comme on pouvait s'y attendre, nous pourrions observer que J_{sc} et le rendement a légèrement diminué avec l'augmentation de l'épaisseur de 10 à 70 nm avec 32.33 à 32.28 mA/cm², 13.53% à 13.51 % respectivement. Les rendements commencent à diminuer

lorsque l'épaisseur de couche fenêtre augmente est principalement en raison de la diminution de J_{sc} . Ensuite le V_{oc} reste constant sur toute la plage des épaisseurs de la couche fenêtre considéré de valeur 0.60 V et FF reste presque constant de valeur autour de 68.83% pour une épaisseur 60 nm, et une légère diminution dans un épaisseur 70 nm de valeur 68.82 %.

En outre, quand la couche ZnO est très épaisse, influe sur la création des paires électron-trou, et ou la diminution de rendement donc la performance de cellules se dégrade en raison d'une part de l'augmentation de pertes, et d'autre part de l'épaisseur de la couche. Plus l'épaisseur diminue, plus l'absorption augmente (pour les longues longueurs d'onde). Par conséquent une épaisseur optimale de la couche ZnO est nécessaire pour la meilleure performance de la cellule solaire. Donc on peut choisir l'épaisseur la plus petite de la couche en ZnO pour avoir des résultats acceptables du rendement η , du facteur de forme FF , de la densité de courant de court-circuit J_{sc} et la tension de circuit ouvert V_{oc} . Il est clair que on va choisir la valeur optimale de 10 nm donne le rendement avec 13.53% de ce film.

IV.5.3 Effet de l'épaisseur de la couche buffer CdS sur les performances des Chalcopyrites

La couche buffer est située entre la couche absorbante CIS et la fenêtre optique de ZnO:Al. Si un contact (couche absorbante/fenêtre optique) est directement réalisé, une jonction photovoltaïque peut exister. En revanche, son rendement sera limité par l'inadaptation des bandes interdites et les courants de fuite dus à la présence de zones désordonnées aux joints de grains. De ce fait, il est préférable d'introduire une fine couche, dite couche buffer, entre ces deux composés afin d'optimiser les performances de la cellule CIS. En effet, lorsque la taille de CdS diminue, le nombre de particules par gramme s'accroît considérablement. Et donc si la taille de la couche tampon diminue, le matériau CdS devient un bon Buffer dans notre travail.

L'épaisseur de la couche CdS est variée de 10 nm à 70 nm tandis que les épaisseurs des couches en ZnO et en CIS sont fixées (50 nm, 300 nm respectivement). Les variations de ce paramètre de la couche CdS, tirés des différentes performances électriques, sont vu dans le tableau (IV.7).

Tableau. IV. 7 : Effet de variation de l'épaisseur de la couche buffer CdS sur les caractéristiques électriques de la cellule solaire à base de CIS.

| Thickness (nm) | V_{oc} (v) | J_{sc} (mA/cm ²) | FF (%) | Efficiency (%) |
|----------------|--------------|--------------------------------|--------|----------------|
| 10 | 0.6080 | 32.182788 | 68.05 | 13.31 |
| 20 | 0.6078 | 32.290600 | 68.76 | 13.50 |
| 30 | 0.6078 | 32.309549 | 68.87 | 13.52 |
| 40 | 0.6079 | 32.323116 | 68.93 | 13.54 |
| 50 | 0.6080 | 32.335860 | 68.99 | 13.56 |
| 60 | 0.6081 | 32.348089 | 69.05 | 13.58 |
| 70 | 0.6081 | 32.359842 | 69.11 | 13.60 |

Le meilleur matériau proposé pour la formation de l'hétérojonction photovoltaïque avec le CIS est le sulfure de Cadmium CdS, Elle est jouée deux rôles, électriquement, la couche tampon d'optimiser l'alignement des bandes entre la couche absorbante et la couche fenêtre et de limiter les recombinaison des porteurs à l'interface de ces deux couches. On outre, elle permet de protéger la surface de l'absorbeur. Notre simulation a été réalisée en étudiant les effets de la variation de l'épaisseur de la couche buffer sur les paramètres de la cellule photovoltaïque avec une valeur d'énergie de bande interdite de 2.40 eV. Les paramètres de performance de la cellule sont calculés en fonction de l'épaisseur de la couche buffer dans l'intervalle de l'épaisseurs 10 à 70 nm.

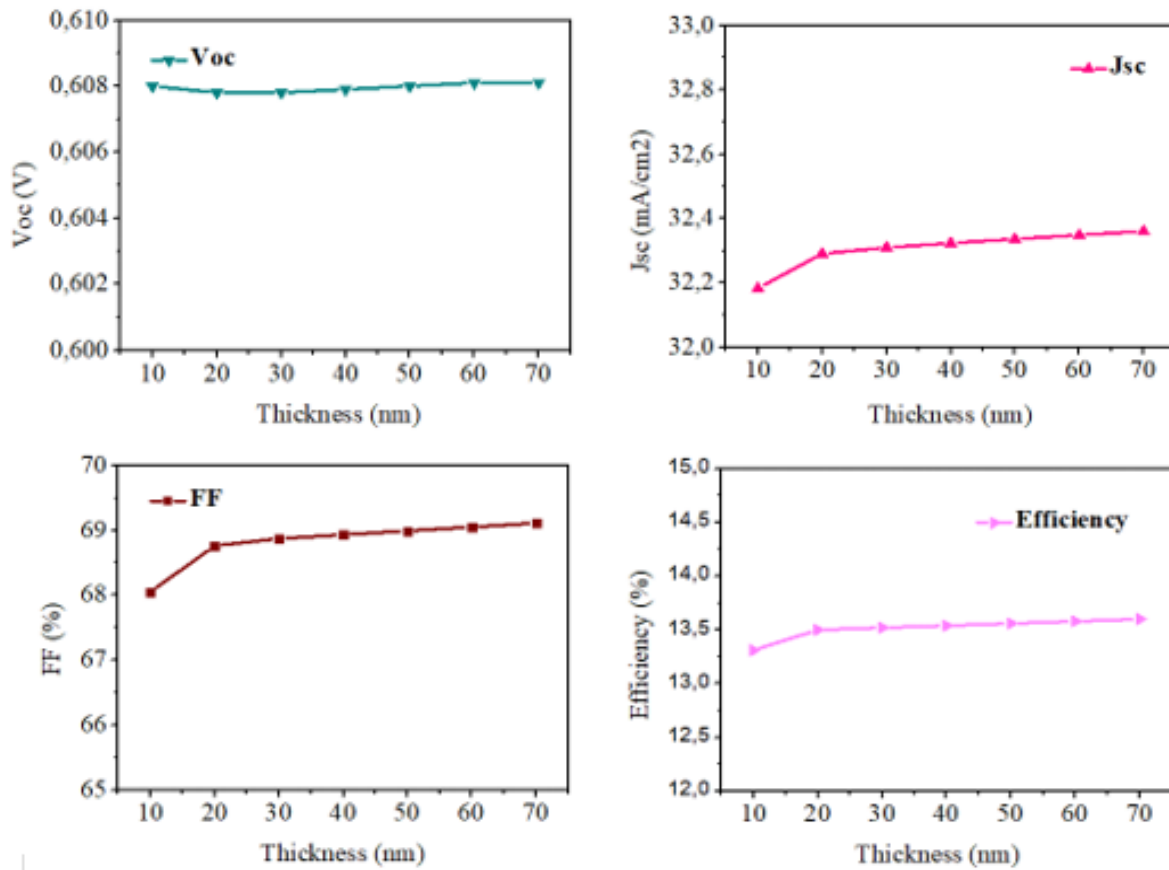


Figure IV.46 : Variation des paramètres de performance de la cellule avec l'épaisseur de la couche buffer CdS : V_{oc} , J_{sc} , FF et rendement.

Pour explorer l'effet de la couche buffer sur les caractéristiques photovoltaïques, nous sommes intéressés aux paramètres de performance de buffer avec différentes configurations des valeurs d'épaisseurs. La figure IV.46. illustre les résultats des paramètres de performance photovoltaïque des cellules solaires chalcopyrites possédant divers variation de l'épaisseurs de la couche buffer . Il est clairement distingué que le rendement augmente lorsque l'épaisseur de la couche buffer augmente. Aussi pour J_{sc} , FF néanmoins, la tension de circuit ouvert reste presque constante. À titre de déduction, les caractéristiques de performance PV calculées sont améliorées Nos résultats suggèrent que le buffer d'épaisseur optimal 70 nm offrent de meilleures performances que d'autres épaisseurs avec une rendement 13.60%. Ces résultats raisonnables parce que l'énergie du gap de CdS est plus importante que l'énergie de gap de CIS, L'épaisseur de cette couche buffer doit être mince et sa largeur de bande interdite doit être aussi élevée.

IV.5.4 Influence de la densité de défaut sur les performances des Chalcopyrites

Étant donné que les panneaux de cellules solaires sont affectés par les changements de défaut ce dernière jouent le rôle de centres de recombinaison pour les porteurs de charges. Les caractéristiques des matériaux semi-conducteurs sont fortement influencées par les impuretés ou les défauts. Ces derniers sont ajoutés pour augmenter la conductivité électrique ou le contrôle de la durée de vie, mais souvent ces impuretés ou ces imperfections dans le réseau, à partir d'un certain seuil, agissent comme facteurs de perte, par conséquent une concentration élevée de défauts défavorise le transport des porteurs, réduisant ainsi le rendement de conversion. Dans cette partie nous intéressons d'étudier les variations de l'épaisseurs et l'effet de défaut pour la couche ZnO, CdS sur les caractéristiques électriques pour cela nous utilisons les valeurs optimales de l'épaisseur de ces couches que mentionnes précédent.

IV.5.4.1 Influence de densité de défauts de couche fenêtre ZnO en fonction de variation de l'épaisseur

Tableau. IV. 8 : Effet de défaut et les différentes épaisseurs de la couche fenêtre ZnO sur les caractéristiques électriques de la cellule solaire à base de CIS.

| Thickness (nm) | V_{oc} (v) | J_{sc} (mA/cm ²) | FF (%) | Efficiency (%) |
|----------------|--------------|--------------------------------|--------|----------------|
| 10 | 0.6078 | 32.335682 | 68.83 | 13.53 |
| 20 | 0.6078 | 32.326174 | 68.83 | 13.52 |
| 30 | 0.6078 | 32.316174 | 68.83 | 13.52 |
| 40 | 0.6078 | 32.305745 | 68.83 | 13.51 |
| 50 | 0.6078 | 32.295062 | 68.82 | 13.51 |
| 60 | 0.6078 | 32.284316 | 68.82 | 13.50 |
| 70 | 0.6078 | 32.273644 | 68.82 | 13.50 |

Pour étudier la dépendance des caractéristiques du dispositif vis-à-vis de la densité de défauts de la couche fenêtre de cellule solaire chalcopyrites, nous avons simulé les performances de la cellule solaire en sélectionnant la couche ZnO la plus performantes. Notre simulation a été réalisée en étudiant les effets de défaut et de la variation de l'épaisseur de la couche fenêtre sur les paramètres de la cellule photovoltaïque sont présentés sur la figure IV.47. Comme on peut le constater, V_{oc} est de valeur constant 0.60 V, le rendement est réduit de 13.53% à 13.50 %. En outre, tous les autres paramètres de cellule J_{sc} , et FF ont chuté à 32.27 mA/cm², et 68.82 %, respectivement. Nous remarquée une diminution de collecte des porteurs photo générée

jusqu'aux électrodes, car doivent parcourir une plus longue distance avant d'atteindre les contacts donc une diminution du rendement de conversion due au phénomène de recombinaison. Le rendement 13.53% est dans un choix d'épaisseur 10 nm. Nous pouvons conclure que l'augmentation de l'épaisseur de couche fenêtre influe sur la création des paires électron-trou donc détériore la performance de cellule solaire. Il est préférable d'introduire une fine couche.

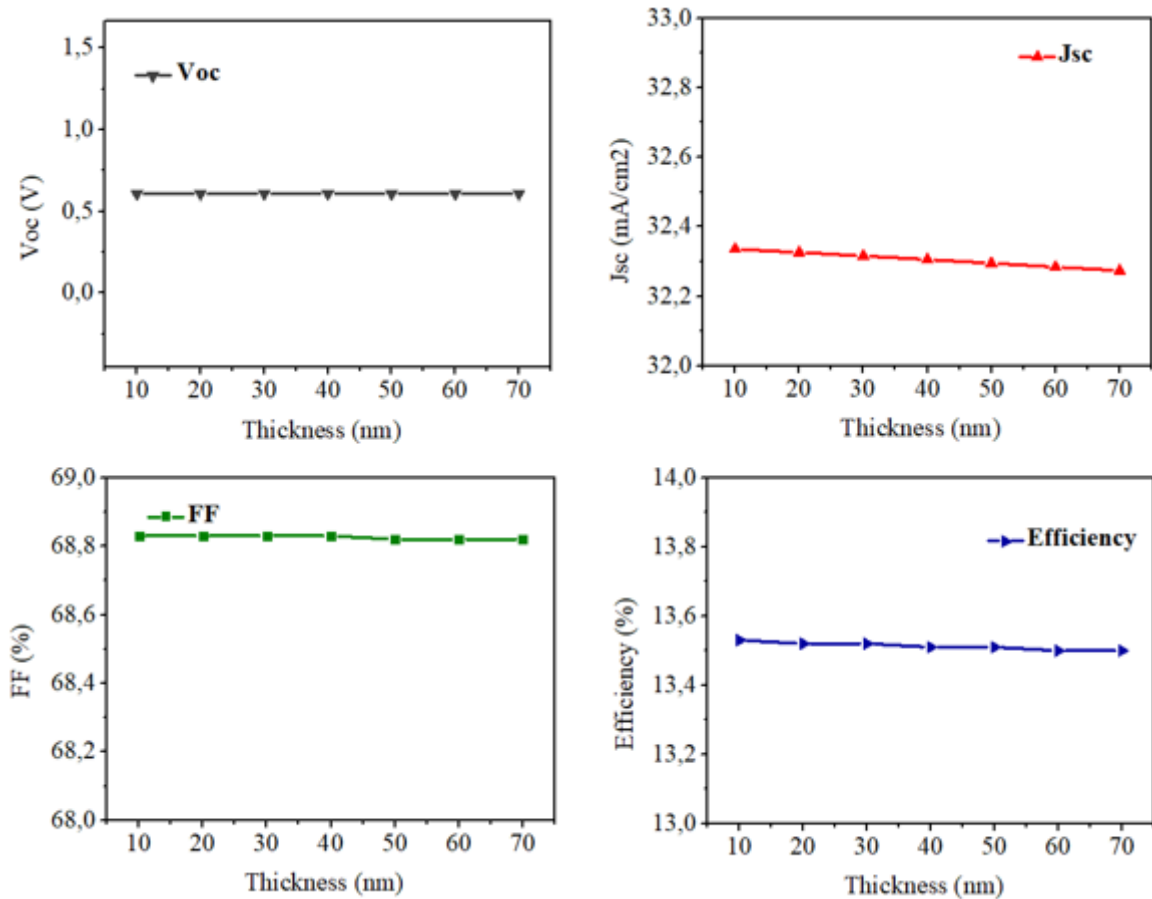


Figure IV.47 : Effet de densité du défaut en fonction de variation de l'épaisseur de la couche fenêtre ZnO sur les performances de la cellule en chalcopyrite V_{oc} ; J_{sc} ; FF ; rendement.

IV.5.4.1.1 Effet de densité du défaut en fonction de différentes épaisseurs de la couche fenêtre ZnO sur le rendement quantique externe de cellule solaire chalcopyrite

La figure IV.48. illustre les courbes d'efficacité quantique des cellules solaires CIS en fonction de la densité de défaut et variation de l'épaisseur de couche fenêtre . On peut constater pour toutes les différentes plages d'épaisseur de la couche fenêtre une nette augmentation du rendement quantique externe dans l'intervalle 300 à 380 nm dans la région de longueur d'onde (inférieure à 380 nm) Toutefois, Le rendement quantique externe présente également une diminution considérable sur toute la gamme des longueurs d'onde dans l'intervalle 380 nm à 900 nm pour les longueurs d'onde (supérieures à 380nm). Forte densité de défauts dans un couche fenêtre de grande épaisseur crée de centres de recombinaisons de paires électrons trous avants d'atteindre la zone de charge d'espace et être collecté ce qui réduit le nombre de porteurs de charges collecté (électrons libres) et défavorisé le transport de porteurs de charge donc une diminution du rendement quantique QE.

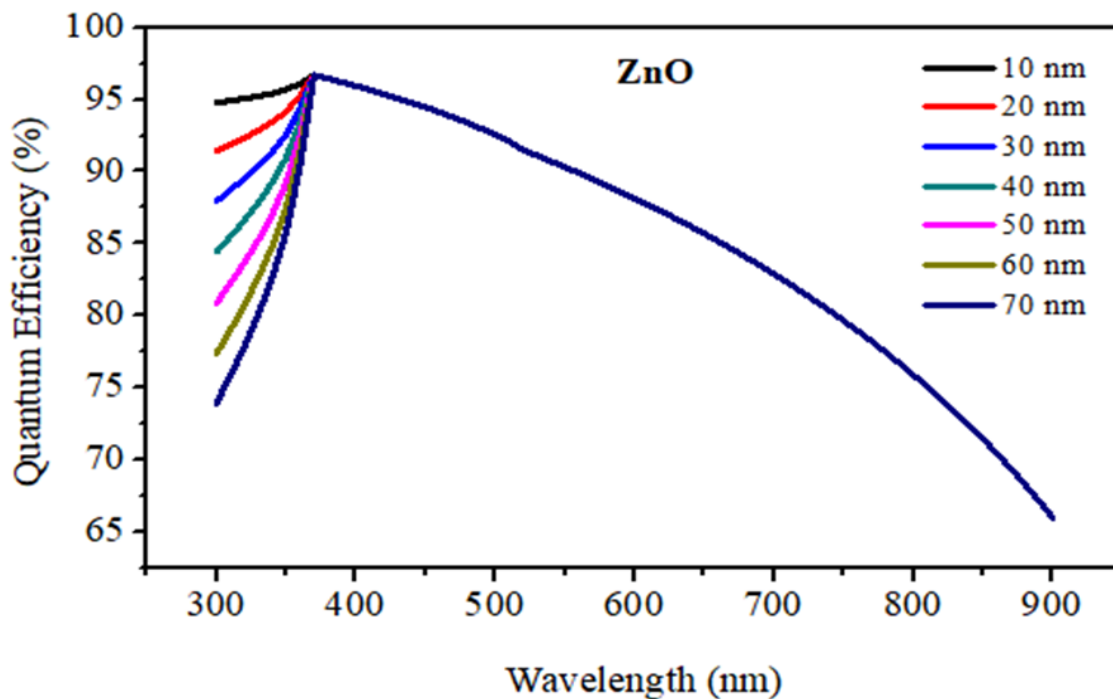


Figure IV.48 : Courbes de simulation du rendement quantique dans les cellules solaires de type CIS en fonction de densité de défaut pour les différentes épaisseurs de la couche ZnO.

IV.5.4.2 Influence de densité du défaut de la couche buffer CdS en fonction de variation de l'épaisseur

Tableau. IV.9 : Effet de défaut et les différentes épaisseurs de la couche buffer CdS sur les caractéristiques électriques de la cellule solaire à base de CIS.

| Thickness (nm) | V_{oc} (v) | J_{sc} (mA/cm ²) | FF (%) | Efficiency (%) |
|----------------|--------------|--------------------------------|--------|----------------|
| 10 | 0.6077 | 31.954963 | 67.95 | 13.19 |
| 20 | 0.6072 | 31.806891 | 68.58 | 13.24 |
| 30 | 0.6070 | 31.575604 | 68.60 | 13.15 |
| 40 | 0.6068 | 31.348889 | 68.58 | 13.04 |
| 50 | 0.6066 | 31.131635 | 68.56 | 12.95 |
| 60 | 0.6064 | 30.923714 | 68.55 | 12.85 |
| 70 | 0.6200 | 30.724696 | 66.93 | 12.75 |

En outre, nous avons étudié l'effet des défauts de couche buffer sur la performance de la cellule solaire chalcopirite La figure IV.49. Montre la variation de V_{oc} , J_{sc} , FF et du rendement en fonction de l'effet du défaut et la variation de toutes l'épaisseurs de couche buffer. Comme on pouvait s'y attendre, les V_{oc} reste presque constant suite une augmentation pour atteindre une valeur maximale de 0.62 V avec l'épaisseur 70 nm, le valeur FF augmente pour une valeur 68.58 % ensuite reste presque constant dans les intervalles d'épaisseurs entre 20 à 60 nm suite par une diminution dans l'épaisseur 70 nm pour 66.93%. De plus une légère augmentation de rendement entre les épaisseurs 10 à 20 nm de rendement 13.19% à 13.24% respectivement suivie par une diminution successive de façon linéaire avec l'augmentation de l'épaisseur dans l'intervalle de 20 à 70 nm de rendement 13.24% à 12.75% respectivement.

Le phénomène de recombinaison peut donc réduire la possibilité des électrons libres générés par le rayonnement incident au contact avant et donc contribuer à abaisser la valeur de J_{sc} en termes de perte électron-trou ce qui influe sur la diminution de rendement. L'augmentation de la densité du piège profond accélère la probabilité de phénomène de recombinaison des paires électrons-trous et par conséquent la diminution de la collection de charge sur les électrodes et la dégradation de rendement. Une couche plus épaisse de buffer, une probabilité plus grande de porteur de charge se recombiner via des défauts au lieu de diffuser vers la zone de charge d'espace qui se fait par le champ plutôt que la diffusion. Nous pouvons en conclure que les paramètres actuels de nos cellules solaires sont sensibles à la densité de défauts élevée dans la

couche buffer qui doit être la plus possible mince. Le rendement le plus élevé 13.24 % a été obtenue pour une épaisseur de 20 nm.

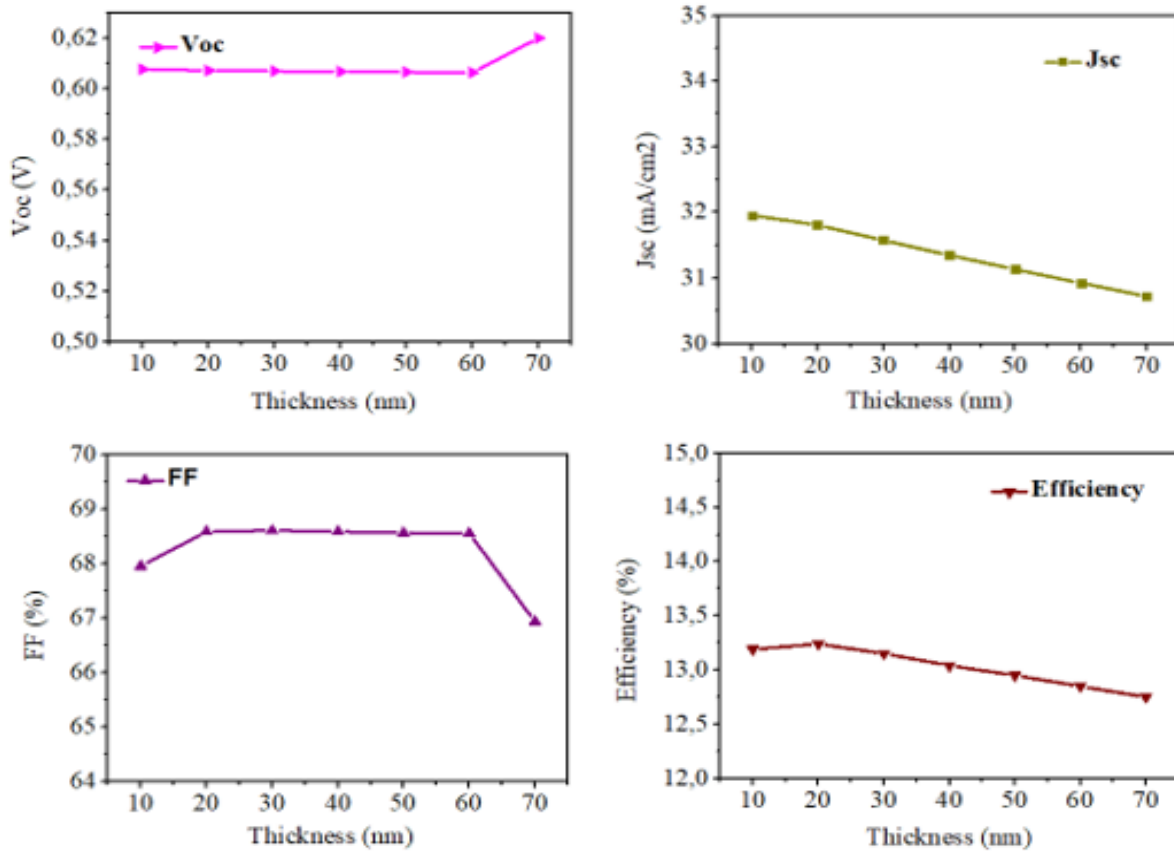


Figure IV.49 : Effet de la densité du défaut en fonction de variation de l'épaisseur de la couche buffer CdS en chalcopyrite sur les paramètres de la cellule V_{oc} ; J_{sc} ; FF ; rendement.

IV.5.4.2.1 Effet de la densité du défaut en fonction de différentes épaisseurs de la couche buffer CdS sur le rendement quantique externe de la cellule solaire chalcopyrite

La figure IV.50. illustre les courbes d'efficacité quantique des cellules solaires CIS en fonction de la densité du défaut et variation de l'épaisseur de la couche buffer . On peut observer pour toutes les différentes plages d'épaisseurs de la couche buffer une nette augmentation du rendement quantique externe dans d'intervalle 300 à 560 nm dans la région de courte longueur d'onde (inférieure à 560 nm) Toutefois, une diminution pour les grandes longueurs d'onde (supérieures à 560nm) dans l'intervalle 560 à 900 nm. Donc dans un couche buffer épaisse la forte densité de défauts conduire la recombinaison ce qui diminue le nombre de paires électrons-trous générées et réduire le transport de porteurs de charges donc une décroissance du rendement quantique externe QE. (Le taux de recombinaison augmente avec l'accroissement

de la densité des défauts dans la région intrinsèque donc favorise la recombinaison des photoporteurs de charges)

Les recombinaisons aux grandes longueurs d'ondes s'expliquent par le fait que plus la longueur d'onde est grande, plus elle pénètre dans le matériau. Ainsi, les porteurs de charges créés ont une probabilité plus grande de se recombiner via des défauts au lieu de diffuser vers la zone de charge espace. Elles peuvent être d'origine interfaciale à travers les discontinuités de bandes positives ou négatives au niveau de la bande de conduction qui peuvent exister entre la couche tampon et l'absorbeur.

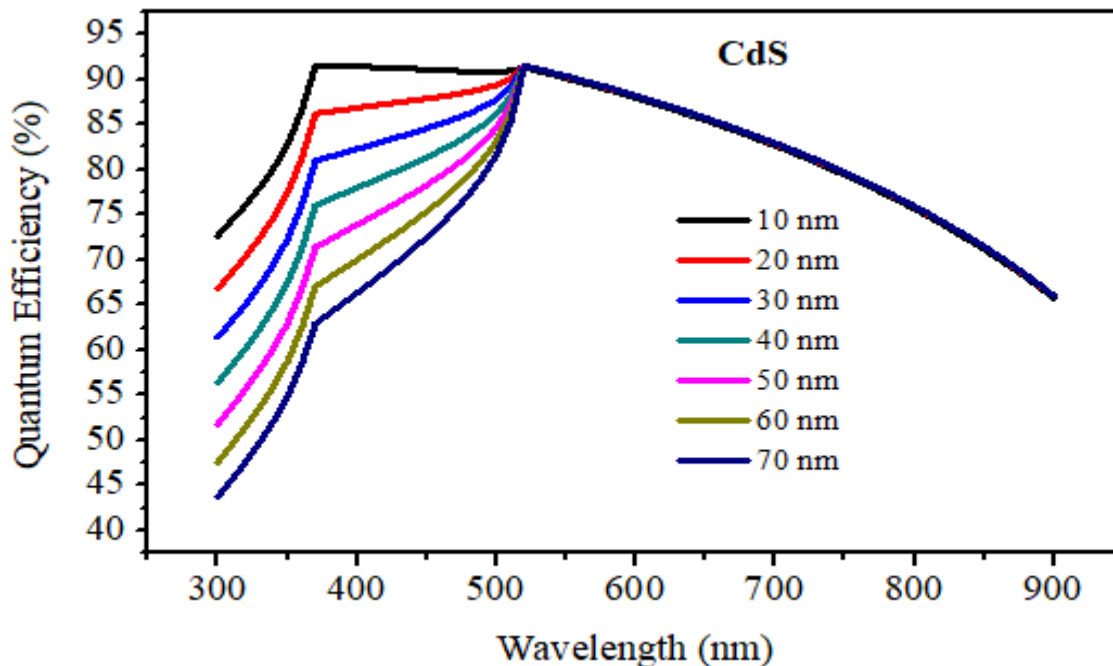


Figure IV.50 : Courbes de simulation du rendement quantique dans les cellules solaires de type CIS en fonction de la densité du défaut pour les différentes épaisseurs de la couche CdS.

IV.6 Conclusion

Dans ce travail, nous avons fait une optimisation par simulation d'une cellule solaire à base de CIS ayant une nouvelle structure hétérojonction [(n)ZnO/(n)CdS/(p)CIS/Mo] sous environnement SCAPS-1D. Cette optimisation concerne la géométrie de la cellule en l'occurrence, les épaisseurs de la couche absorbeur, la couche buffer et la couche fenêtre et les propriétés physiques du matériau. Afin d'évaluer l'impact de l'épaisseur sur les performances du dispositif, et pour déterminer les paramètres optimaux et l'amélioration de la performance des cellules solaires, Ensuite ces cellules solaires ont été étudiée en ajoutant les densités des

défauts de couche buffer et fenêtre pour étudier l'effet de défaut pour les différentes valeurs d'épaisseurs sur les performances du dispositif V_{oc} ; J_{sc} ; FF ; rendement, et aussi la variation du rendement quantique de la cellule solaire CuInSe₂ en fonction de la longueur d'onde incidente pour différentes épaisseurs de la couche de ZnO et CdS, Nous pouvons dire que les paramètres de chaque couche jouent un rôle très important vis-à-vis des performances du dispositif, de même la variation de l'épaisseur de différentes couches de cellule solaire peut affecter sur la création des paires électron-trou, la mobilité, transport et collecte les porteurs photogénèses. Nous avons, par ailleurs, pu optimiser des épaisseurs pour chaque couche. Ce qui permet à la fois une meilleure absorption de porteur des photons de courte et longue longueur d'onde et une réduction considérable des pertes électriques associées aux mécanismes de recombinaison à l'interface.

Les dispositifs photovoltaïques multicouches peuvent atteindre un niveau élevé des rendements de conversion et pourrait donc potentiellement réduire le coût de l'électricité solaire. En effet, les propriétés intrinsèques de la cellule sont très importantes et influencent largement les performances de celle-ci telle que les épaisseurs des couches composant la cellule et le défaut qui accélère la vitesse de phénomène de recombinaison plus important qui détériore la performance de cellule solaire chalcopyrites. Ceci est illustré dans les caractéristiques (J-V) et les courbes obtenues pour le rendement quantique externe (QE).

Conclusion générale

Le travail réalisé dans cette thèse constitue une contribution à la conception d'optimisation et la simulation de nouvelles structures de couches minces en hétérojonction basées sur le semiconducteur de type nouveaux matériaux chalcopyrites, Notre principal objectif a été de modéliser et de calculer les caractéristiques électriques de performance ainsi que prédire de nouvelles structures des cellules solaires en utilisant les modèles de simulations numériques basés sur le simulateur solaire unidimensionnel SCAPS-1D. Cette étude a principalement porté sur les performances photovoltaïques de la cellule solaire en l'occurrence le courant de court-circuit, la tension en circuit ouvert, le facteur de forme, le rendement de conversion, mais également sur les caractéristiques courant-tension (J-V) et rendement quantique externe (QE). Dans une première partie de l'étude. Nous sommes intéressés à étudier les caractéristiques électriques des cellules solaires à hétérojonction basées sur le CIS et les performances de la cellule ont été optimisées en fonction de la variation des paramètres de l'épaisseurs de la couche absorbeur. Nous avons examiné l'effet de la variation de l'épaisseur de les deux couche buffer et fenêtre dans ces cellules solaires. Dans la seconde partie, Nous avons aussi étudié les défauts de couche buffer et fenêtre en fonction de variation de l'épaisseur sur les performances photovoltaïques de la cellule solaire et également sur les caractéristiques courant tension J(V) et rendement quantique externe (QE). En outre, les mobilités des électrons et des trous, la densité de porteurs de la cellule seraient également affectées par les défauts.

La modélisation de la nouvelle structure de l'absorbeur CIS/CdS, nous a permis d'augmenter la création des paire électrons trou, mobilité, transport et collection de porteurs de charges en absorbant davantage les photons afin d'améliorer les performances de la cellule solaire. Les paramètres photovoltaïques obtenus sont donnés comme suite : V_{oc} est égale 0.65 V par contre le J_{sc} est égale à 39.42 mA/cm^2 . Par conséquent le FF obtenu est de 78.28 % ainsi le rendement de conversion est de 20.24 % pour le CIS. Nous avons montré que la variation de l'épaisseur de la couche d'absorbeur CIS implique une augmentation du rendement jusqu'à atteindre sa valeur maximale à une épaisseur de 1300 nm avec une bande interdite de 1.15 eV. Finalement nos résultats ont montré que la nouvelle structure de l'absorbeur proposée a permis d'améliorer les performances des cellules solaires avec un rendement de l'ordre 20.24 % pour une cellule solaire chalcopyrite parfaite.

Anthology

Summary

This thesis is a contribution to the design and simulation of thin-film solar cells heterojunction based on new rare chalcopyrite materials. In the first step, we extended our study to model a new absorber layer consisting of two ultra-thin layers of chalcopyrite with CdS. We then studied the effect of the thickness of absorber layer on the device performance of chalcopyrite solar cells. After That, we investigated the impact of the density of the defects on the performances of the solar cell since these are very sensitive to the large values of density of the defects. Our results show that perfect solar cell chalcopyrite performances are improved with an efficiency obtained can exceed of 20.24% for CIS/CdS. In the end, we found that our simulation results advocate for a viable route to design electron-hole transporting materials and can contribute directly to the mobility and collection of charge carriers to improve chalcopyrite solar cells performance for highly efficient and excellent stable using the new scientific software SCAPS-1D that made the purpose of our work.

Keywords: Solar cells, thin layer, CIS/CdS, Simulation, SCAPS-1D.

Résumé

Cette thèse est une contribution à la conception et la simulation des cellules solaires à couche minces hétérojonction de type nouveaux matériaux rares chalcopyrites. Dans un premier temps, nous avons élargi notre intérêt par la modélisation d'une nouvelle couche d'absorbeur faite de deux couches très minces de type chalcopyrites avec CdS. Nous avons ainsi étudié l'effet de l'épaisseur de la couche d'absorbeur sur les performances des cellules solaires de type chalcopyrites. Nous avons étudié par la suite l'impact de la densité des défauts sur les performances de la cellule solaire vu que ces derniers sont très sensibles aux larges valeurs de densité des défauts. Nous avons remarqué une amélioration, les résultats ont montré que les performances parfaites des cellules solaires chalcopyrites ont été amélioré avec un rendement de l'ordre de 20,24% pour CIS/CdS. En fin nous avons constaté que les résultats de nos simulations préconisent une voie viable pour la conception de matériaux de transport électron-trou et peut contribuer de façon directe dans la mobilité et collecte de porteurs de charges pour améliorer la performance des cellules solaires chalcopyrites hautement efficaces et excellentes stables en utilisant le nouveau logiciel scientifique SCAPS-1D qui a fait le but de notre travail.

Mots clés: Cellules solaires, couche mince, CIS/CdS , Simulation, SCAPS-1D.

ماخص

هذه الأطروحة هي مساهمة في تصميم و محاكاة الخلايا الشمسية ذات الاغشية الرقيقة غير المتجانسة القائمة على مواد الكالكوبريت الجديدة النادرة في الخطوة الأولى ، قمنا بتوسيع دراستنا لتصميم طبقة ممتصة جديدة تتكون من طبقتين رفيفتين جداً من الكالكوبريت مع CdS. ثم درسنا تأثير سمك طبقة الامتصاص على أداء الجهاز الخلايا الشمسية الكوبيرايرت. بعد ذلك ، درسنا تأثير كثافة العيوب على أداء الخلية الشمسية حيث إنها حساسة للغاية للقيم الكبيرة لكثافة العيوب . تظهر نتائجنا انه تم تحسين فعالية أداء الخلايا الشمسية الكالكوبريت المثالية بكفاءة يمكن أن تتجاوز 20,24٪ في CIS/CdS. في النهاية ، وجدنا أن تدافع نتائج المحاكاة عن طريق ناجح لتصميم مواد نقل الكترولون و الثقوب ويمكن أن تساهم بشكل مباشر في سرعة حركة وجمع حاملات الشحن لتحسين أداء الخلايا الشمسية الكالكوبريت عالية الكفاءة وثابتة باستخدام البرنامج العلمي الجديد SCAPS-1D الذي مثل هدف عملنا.

الكلمات المفتاحية: الخلايا الشمسية، الطبقة الرقيقة، CIS/CdS، المحاكاة، SCAPS-1D.

Bibliography

- [1] S. Chu and A. Majumdar, “Opportunities and challenges for a sustainable energy future,” *nature*, vol. 488, no. 7411, p. 294, 2012.
- [2] “http://www.ren21.net/wp-content/uploads/2016/06/GSR_2016_FullReport_.pdf, (2016).”
- [3] “[https://notalotofpeopleknowthat.wordpress.com/2018/06/15/bp-energy-review/.](https://notalotofpeopleknowthat.wordpress.com/2018/06/15/bp-energy-review/)”
- [4] J. L. Stone, “Photovoltaics: Unlimited electrical energy from the sun,” *Physics Today*;(United States), vol. 46, no. 9, 1993.
- [5] R. R. King et al., “24th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition,” Hamburg, Germany, 2009.
- [6] H. J. Hovel, “Solar cells for terrestrial applications,” *Solar Energy*, vol. 19, no. 6, pp. 605–615, 1977.
- [7] T. L. Amu, “Performance Optimization of Tin Halide Perovskite Solar Cells Via Numerical Simulation,” PhD Thesis, 2014.
- [8] A.A. KANOUN, Etude théorique et prédictive des nouveaux matériaux pour conception des cellules solaires et applications photovoltaïques, thèse Doctorat En Sciences, Université Abou-Bekr Belkaid -Tlemcen, En 2019.
- [9] “[<http://www.irena.org/publications/2015/May/Renewable-Energy-and-Jobse> Annual-Review-2015, (2015).”
- [10] C. Battaglia, A. Cuevas, and S. De Wolf, “High-efficiency crystalline silicon solar cells: status and perspectives,” *Energy & Environmental Science*, vol. 9, no. 5, pp. 1552–1576, 2016.
- [11] F. Fertig et al., “Mass production of p-type Cz silicon solar cells approaching average stable conversion efficiencies of 22%,” *Energy Procedia*, vol. 124, pp. 338–345, 2017.
- [12] K. Yoshikawa et al., “Silicon heterojunction solar cell with interdigitated back contacts for a photoconversion efficiency over 26%,” *Nature Energy*, vol. 2, no. 5, p. 17032, 2017.
- [13] R. Fu, D. Chung, T. Lowder, D. Feldman, K. Ardani, and R. Margolis, “U.S. Solar Photovoltaic System Cost Benchmark: Q1 2016,” National Renewable Energy Lab. (NREL), Golden, CO (United States), NREL/TP-6A20-66532, Sep. 2016.
- [14] <https://data.nrel.gov/submissions/53>.

-
- [15] Loïc Bailly, « Cellules photovoltaïques organiques souples a grande surface », thèse de doctorat, Université Bordeaux I, 2010.
- [16] Udai. Singha, William. Shafarman, Robert. Birkmire, "Surface sulfurization studies of Cu(InGa)Se₂ thin film", Solar Energy Materials & Solar Cells 90, 623–630 (2006).
- [17] P. Jackson, R. Wuerz, D. Hariskos, E. Lotter, W. Witte, and M. Powalla, "Effects of heavy alkali elements in Cu (In, Ga) Se₂ solar cells with efficiencies up to 22.6%," *physica status solidi (RRL)*–Rapid Research Letters, vol. 10, no. 8, pp. 583–586, 2016.
- [18] http://www.nrel.gov/ncpv/images/efficiency_chart.jpg.
- [19] A. Mekemeche, « Modélisation à deux dimensions des propriétés physiques de cellules solaires au silicium à base de substrat de type n. Étude de quelques cas particuliers de cellules innovantes. », Thèse de Doctorat En Physique, Université Abdel Hamid Ibn Badis de Mostaganem, 2017.
- [20] J. Metzdorf, S. Winter, and T. Wittchen, "Radiometry in photovoltaics: calibration of reference solar cells and evaluation of reference values," *Metrologia*, vol. 37, no. 5, p. 573, 2000.
- [21] https://fr.wikipedia.org/wiki/Raies_de_Fraunhofer.
- [22] P. Lyons, J. Wong, and M. Bhandari, "A comparison of window modeling methods in EnergyPlus 4.0," *Proc. SimBuild*, vol. 4, no. 1, pp. 177–184, 2010.
- [23] "American Society for Testing and Materials (ASTM), G173-03, ISO 9845-1 (1992). - Yahoo Search - Actualités." [Online]. Available: [https://fr.search.yahoo.com/search?fr=mcafee&type=E210FR91105G0&p=America+n+Society+for+Testing+and+Materials+\(ASTM\)%2C+G173-03%2C+ISO+9845-1+\(1992\)](https://fr.search.yahoo.com/search?fr=mcafee&type=E210FR91105G0&p=America+n+Society+for+Testing+and+Materials+(ASTM)%2C+G173-03%2C+ISO+9845-1+(1992)). [Accessed: 06-Mar-2019].
- [24] R. J. Komp, "Practical Photovoltaics," Ann Arbor Aatec Publ., 1995.
- [25] S. Fonash, *Solar cell device physics*. Elsevier, 2012.
- [26] P. Rappaport, "The photovoltaic effect and its utilization," *Sol. Energy*, vol. 3, no. 4, pp. 8–18, 1959.
- [27] B. O'regan and M. Grätzel, "A low-cost, high-efficiency solar cell based on dyesensitized colloidal TiO₂ films," *nature*, vol. 353, no. 6346, p. 737, 1991.

-
- [28] Z. El Jouad, "Réalisation et caractérisation des cellules photovoltaïques organiques," PhD Thesis, Université d'Angers, 2016.
- [29] <https://www.photovoltaique.info/fr/Les-types-de-modules.html/>.
- [30] "National Renewable Energy Laboratory (NREL) Home Page | NREL." [Online]. Available: <https://www.nrel.gov/>. [Accessed: 07-Mar-2019].
- [31] H. J. Hovel, "Semiconductors and semimetals. Volume 11. Solar cells," 1975.
- [32] W. El-Huni, "Modélisation de cellules solaires multi-tandem bas coût et très haut rendement à base de nitrures des éléments III-V," PhD Thesis, Université ParisSaclay, 2016.
- [33] A. Rockett, The materials science of semiconductors. Springer Science & Business Media, 2007.
- [34] J. Nelson, The physics of solar cells. World Scientific Publishing Company, 2003.
- [35] H. J. Hovel, "Semiconductors and semimetals. Volume 11. Solar cells," 1975.
- [36] R. K. Willardson and A. C. Beer, Semiconductors and semimetals, vol. 12. Academic press, 1977.
- [37] M. A. Green, "Solar cells: operating principles, technology, and system applications," Englewood Cliffs, NJ, Prentice-Hall, Inc., 1982. 288 p., 1982.
- [38] A. Kitai, Principles of Solar Cells, LEDs and Diodes: The role of the PN junction. John Wiley & Sons, 2011.
- [39] A. Mahfoud, "Modélisation des cellules solaires tandem à couches minces et à haut rendement," PhD Thesis, 2018.
- [40] P. Würfel and U. Würfel, Physics of solar cells: from basic principles to advanced concepts. John Wiley & Sons, 2016.
- [41] A. R. Jha, Solar cell technology and applications. Auerbach publications, 2009.
- [42] H. Mathieu, T. Bretagnon, and P. Lefebvre, Physique des Semiconducteurs et des Composants Electroniques-Problèmes Résolus. Dunod, 2001.
- [43] M. E. Klausmeier-Brown, "Status, prospects and economics of terrestrial single junction GaAs concentrator cells," Solar Cells and their Applications", Wiley, New York, 1995.

-
- [44] A. Bouraiou, "Elaboration et caractérisation des couches minces CuInSe₂ par électrodéposition," 2009.
- [45] Z. El Jouad, "Réalisation et caractérisation des cellules photovoltaïques organiques," PhDThesis, Université d'Angers, 2016.
- [46] H. Ullah, B. Marí, and H. N. Cui, "Investigation on the Effect of Gallium on the Efficiency of CIGS Solar Cells through Dedicated Software," *Appl. Mech. Mater.*, vol. 448, no. 453, pp. 1497–1501, 2014.
- [47] L. Ribeaucourt, G. Savidand, D. Lincot, and E. Chassaing, "Electrochemical study of one-step electrodeposition of copper–indium–gallium alloys in acidic conditions as precursor layers for Cu (In, Ga) Se₂ thin film solar cells," *ElectrochimicaActa*, vol. 56, no. 19, pp. 6628–6637, 2011.
- [48] A. Duchatelet, "Synthèse de couches minces de Cu (In, Ga) Se₂ pour cellules solaires par électrodépôt d'oxydes mixtes de cuivre-indium-gallium," PhDThesis, Lille 1, 2012.
- [49] L. M. et Nous, "Le photovoltaïque dans tous ses états (2/2)," *Le Monde et Nous*.
- [50] K.BENABED, Etude et simulation d'une cellule solaire à base dechalcopyrites CuInSe₂ avec TCAD – SILVACO, Pour l'obtention du diplôme de Master, Université Abdelhamid Ibn Badis – Mostaganem, En 2017.
- [51] N. Naghavi et al., "Buffer layers and transparent conducting oxides for chalcopyrite Cu(In,Ga)(S,Se)₂ based thin film photovoltaics: present status and current developments," *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, vol. 18, no. 6, pp. 411–433, 2010.
- [52] J. Poortmans and V. Arkhipov, *Thin film solar cells: fabrication, characterization and applications*, vol. 5. John Wiley & Sons, 2006.
- [53] W. N. Shafarman, S. Siebentritt, and L. Stolt, "Cu (InGa) Se₂ Solar Cells," *Handbook of photovoltaic science and engineering*, pp. 546–599, 2010.
- [54] S. Ishizuka, A. Yamada, P. Fons, and S. Niki, "Texture and morphology variations in (In, Ga) 2Se₃ and Cu (In, Ga) Se₂ thin films grown with various Se source conditions," *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, vol. 21, no. 4, pp. 544–553, 2013.

-
- [55] D. H. Shin, Y. M. Shin, J. H. Kim, B. T. Ahn, and K. H. Yoon, "Control of the preferred orientation of Cu (In, Ga) Se₂ thin film by the surface modification of Mo film," *Journal of The Electrochemical Society*, vol. 159, no. 1, pp. B1–B5, 2011.
- [56] S. Chaisitsak, A. Yamada, and M. Konagai, "Preferred orientation control of Cu (In_{1-x}Ga_x) Se₂ ($x \approx 0.28$) thin films and its influence on solar cell characteristics," *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 41, no. 2R, p. 507, 2002.
- [57] J.-H. Yoon, W.-M. Kim, J.-K. Park, Y.-J. Baik, T.-Y. Seong, and J. Jeong, "Control of the preferred orientations of Cu (In, Ga) Se₂ films and the photovoltaic conversion efficiency using a surface-functionalized molybdenum back contact," *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, vol. 22, no. 1, pp. 69–76, 2014.
- [58] M. A. Contreras, K. M. Jones, L. Gedvilas, and R. Matson, "Preferred orientation in polycrystalline Cu (In, Ga) Se $\{\$sub 2\}\$ and its effect on absorber thin-films and devices," National Renewable Energy Lab., Golden, CO (US), 2000.$
- [59] S. M. Jasinski, "Mineral commodity summaries 2016," US Geological Survey, pp. 124–125, 2016.
- [60] A. Luque, S. Hegedus "Handbook of photovoltaic science and engineering" John Wiley & Sons, (2011).
- [61] B. Equer "Energie solaire photovoltaïque. Physique et technologie de la conversion photovoltaïque ",(Ellipses, UNESCO, 1993), p. 66-137, (1993).
- [62] M. Turcu, I. M. Kötschau, and U. Rau, "Composition dependence of defect energies and band alignments in the Cu (In 1- x Ga x)(Se 1- y S y) 2 alloy system," *Journal of Applied Physics*, vol. 91, no. 3, pp. 1391–1399, 2002.
- [63] P. D. Paulson, R. W. Birkmire, and W. N. Shafarman, "Optical characterization of CuIn 1- x Ga x Se 2 alloy thin films by spectroscopic ellipsometry," *Journal of Applied Physics*, vol. 94, no. 2, pp. 879–888, 2003.
- [64] Sunghun Jung, SeJin Ahn, Jae Ho Yun, Jihye Gwak, Donghwan Kim, and Yoon Kyunghoon, "Effects of Ga contents on properties of CIGS thin films and solar cells fabricated by co-evaporation technique," *Current Applied Physics*, no. 10(4), pp. 990–996, Jul. 2010.

-
- [65] S. Seyrling et al., “Cu(In,Ga)Se₂ growth process modifications: Influences on microstructure, Na distribution, and device properties.,” *Solar Energy Materials and Solar Cells*, no. 95, pp. 1477–1481, Feb. 2011.
- [66] Marianna Kemell, Mikko Ritala, and Markku Leskelä, “Thin Film Deposition Methods for CuInSe₂ Solar Cells,” *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences*, no. 30(1), pp. 1–31, 2005.
- [67] Tokio Nakada, “Invited Paper: CIGS-based thin film solar cells and modules: Unique material properties,” *Electronic Materials Letters*, no. 8(2), pp. 179–185, Apr. 2012.
- [68] Adrian Chirila, Stephan Buecheler, Fabian Pianezzi, Patrick Bloesch, Christina Gretener, Alexander R Uhl, Carolin Fella, Lukas Kranz, Julian Perrenoud, Sieghard, Seyrling, Rajneesh Verma, Shiro Nishiwaki, Yaroslav E Romanyuk, Gerhard Bilger, and Ayodhya N Tiwari, “Highly efficient Cu(In,Ga)Se₂ solar cells grown on flexible polymer films,” *Nature materials*, no. 10(11), pp. 857–61, Nov. 2011.
- [69] U. Rau and H.W. Schock, “Electronic properties of Cu(In,Ga)Se₂ heterojunction solar cells-recent achievements, current understanding, and future challenges,” *Applied Physics A, Materials Science & Processing*, vol. 69, p. 131, 1999.
- [70] U. Rau, A. Jasenek, H.W. Schock, F. Engelhardt, and T. Meyer, “Electronic loss mechanisms in chalcopyrite based heterojunction solar cells,” *Thin Solid Films*, vol. 361–362, p. 298, 2000.
- [71] N. Messei, “Study of the effect of grading in composition on the performance of thin film solar cells based on AlGaAs and CZTSSe, a numerical simulation approach,” 2016.
- [72] S. W. Koch, J. Hader, A. Thränhardt & J. V. Moloney (auths.), and Joachim Piprek (eds.), *Optoelectronic devices: advanced simulation and analysis*. Verlag New York: Springer, 2005.
- [73] W. Van Roosbroeck, “Theory of the flow of electrons and holes in germanium and other semiconductors,” *The Bell System Technical Journal*, vol. 29, no. 4, pp. 560–607, 1950.
- [74] M. Burgelman, J. Verschraegen, S. Degrave, and P. Nollet, “Modeling thin-film PV devices,” *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, vol. 12, no. 2–3, pp. 143–153, 2004.

-
- [75] T. Minemoto and M. Murata, "Device modeling of perovskite solar cells based on structural similarity with thin film inorganic semiconductor solar cells," *Journal of applied physics*, vol. 116, no. 5, p. 054505, 2014.
- [76] M. Burgelman, P. Nollet, and S. Degrave, "Modelling polycrystalline semiconductor solar cells," *Thin Solid Films*, vol. 361, pp. 527–532, 2000.
- [77] A. Niemegeers and M. Burgelman, "Numerical modelling of ac-characteristics of CdTe and CIS solar cells," in *Conference Record of the Twenty Fifth IEEE Photovoltaic Specialists Conference-1996*, 1996, pp. 901–904.
- [78] M. Burgelman and J. Marlein, "Analysis of graded band gap solar cells with SCAPS," in *Proceedings of the 23rd European Photovoltaic Solar Energy Conference, Valencia, 2008*, pp. 2151–2155.
- [79] M. Burgelman, K. Decock, A. Niemegeers, J. Verschraegen, and S. Degrave, *SCAPS manual*. February, 2016.
- [80] W. S. Yang et al., "Iodide management in formamidinium-lead-halide-based perovskite layers for efficient solar cells," *Science*, vol. 356, no. 6345, pp. 1376– 1379, 2017.
- [81] "Global Market outlook for photovoltaics until 2019. Solar Power Europe.- Yahoo Search - Actualités." [Online]. Available: <https://fr.search.yahoo.com/search?fr=mcafee&type=E210FR91105G0&p=Global+Market+outlook+for+photovoltaics+until+2019.+Solar+Power+Europe>. [Accessed: 06-Mar-2019].
- [82] M. A. Green, "Silicon solar cells: evolution, high-efficiency design and efficiency enhancements," *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 8, no. 1, p. 1, 1993.
- [83] M. Mitsuya et S. Imazeki, *Rev. Sci. Instr.* 61, 2466;1990.
- [84] H. Katagiri, K. Jimbo, S. Yamada, T. Kamimura, W.S. Maw, T.Fukano, T. Ito, T. Motohiro, "Enhanced conversion efficiencies of Cu₂ZnSnS₄-based thin film solar cells by using preferential etching technique", *Appl. Phys. Express* 1 041201, pp. 2, 2008.
- [85] Sarah MENAKH Contribution à l'étude des propriétés de films ZnO » *Mémoire de Magister* », 2010.

[86]. F. CHOUIA, Optimisation du processus d'élaboration de la couche absorbante des cellules solaires à base des matériaux à structure chalcopyrite, Thèse Doctorat En sciences, Université Badji Mokhtar, En 2018.

Bibliography