

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

République Algérienne Démocratique et Populaire

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Mohamed Khider – Biskra

Faculté des Sciences et de la technologie

Département : Génie électrique

Ref : / 2018



جامعة محمد خيذر بسكرة

كلية العلوم والتكنولوجيا

قسم: الهندسة كهربائية

المرجع: 2018/

Thèse présentée en vue de l'obtention du diplôme de

## Doctorat LMD en Electronique

Spécialité: Micro-électronique

Thème

**Etude par simulation numérique d'une cellule solaire en  
CIGS à multi-jonction par le logiciel Tcad Silvaco**

Présentée par :

**Elbar Mourad**

Soutenue publiquement le 21/06/2018

Devant le jury composé de :

Nom et Prénom	Grade	Etablissement	Qualité
Benakcha Abdelhamid	Professeur	U.M.K. Biskra	Président
Tobbeche Souad	Professeur	U.M.K. Biskra	Encadreur
Hocini Abdessalem	Professeur	U.M.B. M'sila	Examineur
Nacereddine Lakhdar	M.C.A	U.H.L. Eloued	Examineur
Hamaizia Zahra	M.C.A	U.M.K. Biskra	Examinatrice

## Remerciements

*Je remercie Allah le tout puissant pour m'avoir donné le courage, la volonté et la patience de mener à terme ce présent travail.*

*Je remercie tout particulièrement mes parents, pour leur soutien inconditionnel au cours de ces longues années d'études.*

*Ce travail a été effectué au laboratoire des matériaux semi-conducteurs et métalliques (LMSM) de l'université Mohamed Khider de Biskra, sous la direction de Mr le professeur Sengouga Noureddine. Je le remercie sincèrement pour m'avoir accueilli au sein du laboratoire.*

*Je tiens à remercier mon encadreur professeur Tobbeche Souad de l'université de Biskra pour m'avoir proposé ce sujet, pour m'avoir fait bénéficier de ses compétences scientifiques et sa constante disponibilité. Elle s'est toujours été prête à me prodiguer ses précieuses orientations.*

*Egalement je tiens à remercier le professeur Elhadj Dogheche pour son invitation, au «l'institut d'électronique microélectronique et nanotechnologies (IEMN)» de l'université de Valenciennes (France),*

*J'adresse mes vives reconnaissances à tous les membres du laboratoire.*

*J'adresse mes sincères remerciements à Mr Benakcha Abdelhamid professeur à l'université de Biskra pour avoir accepté d'être le président de mon jury.*

*Je tiens également à remercier vivement les membres du jury : Mr Hocini Abdessalem professeur à l'université de M'sila et Mr Nacereddine Lakhdar maitre de conférence à l'université d'Eloued et Mme Hamaizia Zahra maitre de conférence à l'université de Biskra pour avoir accepté d'évaluer ce travail et cette thèse.*

*Enfin, je tiens à remercier toute personne qui a contribué de près ou de loin à la réussite de ce travail.*

إهداء

أهدي هذا العمل المتواضع  
إلى صديقي ورفيقي الدرب أخي الفاضل

حسام بوذراع

تعمده الله برحمته الواسعة وطيب ثراه واسكنه فسيح جناته

Mourad

## ملخص

جذبت رقائق الخلايا الشمسية من السيلينيوم، النحاس، الغاليوم، والأنديموم "CuIn<sub>(1-x)</sub>Ga<sub>x</sub>Se<sub>2</sub>" المزيد من الاهتمام في الصناعة الفوتوفولتية في الآونة الأخيرة. لقد وصل مردود الخلايا الشمسية المعتمدة على CIGS ذات وصلة واحدة من أجل فجوة الطاقة التي تتراوح بين 1.2 إلى 1.3 eV إلى 20.1%. زيادة وتحسين أداء هذا النوع من الخلايا الشمسية يكون أساسا باستخدام الخلايا الشمسية ثنائية الوصلة لاستغلال الطيف الشمسي. وهذا هو الغرض الأساسي من عملنا المتمثل في إجراء دراسة بواسطة المحاكاة الرقمية لخلية شمسية من CIGS ثنائية الوصلة باستخدام البرنامج TCAD Silvaco 2D لدراسة أداء الخلايا الشمسية على أساس CIGS أحادية ومزدوجة الوصلة.

في البداية، أجرينا دراسة الخصائص الكهربائية للخلايا الشمسية ذات وصلة واحدة متكونة من مختلف الطبقات ZnO/CdS/CIGS/Mo و ZnO/CdS/CGS/Mo مع سمك ثابت 0.26 μm، 3.5 μm لطبقات الامتصاص من CGS و CIGS على التوالي. تمت محاكاة الخصائص الكهربائية لكثافة التيار الكهربائي بدلالة الجهد J(V) تحت إضاءة AM1.5 وكان مردود التحويل للخلية الأولى 20.32% و 18.9% بالنسبة للخلية الثانية. هذه النتائج للمحاكاة متوافقة جدا مع تلك التي وجدت تجريبيا وبواسطة المحاكاة المتواجدة في المراجع. في الخطوة الثانية كانت نتائج المحاكاة للخلايا الشمسية ثنائية الوصلة (CGS/CIGS) هي: مردود التحويل 25.11%، جهد الدارة المفتوحة 1.08 V، كثافة التيار للدارة القصيرة 16.35 mA/cm<sup>2</sup> ومعامل الجودة 85.09%. المرود 25.11% التي تم الحصول عليه للخلية GGS/CIGS الغير محسنة هو أفضل من النتائج التي تم الحصول عليها باستعمال البرامج (AMPS-1D و Silvaco-atlas) المتواجدة في المراجع. بعد ذلك تم تثبيت سمك الخلية السفلية CIGS ب 3.5 μm وتغيير سمك الخلية العلوية CGS من 0.1 إلى 0.28 μm في الخلية CIGS/CGS. السمك المثالي الذي يوافق أقصى مردود التحويل 26.21% هو 0.19 μm، هذه القيمة تحقق شرط تساوي كثافة التيار للدارة القصيرة في الخلية الشمسية السفلية CIGS والخلية الشمسية العلوية CIGS.

وأخيرا، فإننا قمنا بدراسة تأثير درجة الحرارة على خصائص الخلية الشمسية GGS/CIGS المثالية في مجال يتراوح بين 300 K-400. من نتائج المحاكاة، لاحظنا زيادة طفيفة لكثافة التيار للدارة القصيرة، وانخفاض خطي للخصائص الفوتوفولتية (جهد الدارة المفتوحة، معامل الجودة، مردود التحويل) للخلايا الشمسية (العلية، السفلية) مع زيادة درجة الحرارة.

**الكلمات المفتاحية:** المحاكاة، Tcad Silvaco، الخلايا الشمسية ثنائية الوصلة، CGS، CIGS، المرود، درجة الحرارة.

## Résumé

Les cellules solaires en couches minces par “Copper Indium Gallium Selenide” ( $\text{CuIn}_{(1-x)}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ ) attirent plus d'attention récemment dans l'industrie photovoltaïque. Les cellules solaires de CIGS simple jonction constituées par des couches ayant différents gaps d'énergie de 1.2 à 1.3 eV ont atteint un rendement de conversion record de 20.1 %. Une augmentation et amélioration de ce rendement est prévue principalement en utilisant des cellules solaires double jonction (dénommées tandem) afin d'exploiter tout le spectre solaire, ceci est le but de notre travail. Pour cela, une étude de simulation et de conception d'une cellule solaire en CIGS à double jonction sera effectuée. L'outil de modélisation et de simulation est le logiciel Tcad Silvaco à 2D adapté à l'étude des performances des cellules solaires à base de CIGS simple et double jonction.

Dans un premier temps, nous avons étudié les caractéristiques électriques d'une cellule solaire en couches minces et à hétérojonction à base de  $\text{ZnO}/\text{CdS}(\text{n})/\text{CIGS}(\text{p})/\text{Mo}$  et  $\text{ZnO}/\text{CdS}(\text{n})/\text{CGS}(\text{p})/\text{Mo}$  simple jonction avec épaisseurs fixes des absorbeurs (CIGS, CGS) de  $3.5\mu\text{m}$  et  $0.26\mu\text{m}$ , respectivement. Les caractéristiques électriques de la densité de courant en fonction de la tension  $J(\text{V})$  sous éclairage AM1.5 sont simulées : les rendements de conversion obtenus sont 20.32 % et 18.92%, respectivement. Ces résultats de simulation sont en très bon accord avec ceux trouvés expérimentalement et par simulation existants dans la littérature. Puis dans un deuxième temps, nous avons étudié la cellule solaire tandem en CGS/CIGS, les résultats de la simulation sont : le rendement de conversion  $\eta = 25.11\%$ , la tension en circuit ouvert  $V_{\text{co}} = 1.8\text{ V}$ , la densité du courant de court-circuit  $J_{\text{cc}} = 16.35\text{ mA}/\text{cm}^2$  et le facteur de forme  $\text{FF} = 85.09\%$ . Le rendement simulé de 25.11% obtenue pour la cellule tandem (CGS/CIGS) non optimisée est meilleur que celui reporté dans la littérature et obtenu en utilisant les deux logiciels Silvaco-Atlas et AMPS-1D. Ensuite, l'épaisseur de la cellule inférieure en CIGS étant fixée à  $3.5\mu\text{m}$  nous avons varié l'épaisseur de la cellule supérieure en CGS de  $0.1\mu\text{m}$  à  $0.28\mu\text{m}$  dans la cellule tandem (CGS/CIGS). L'épaisseur optimale correspondante à un rendement de conversion maximal de 26.21 % est de  $0.19\mu\text{m}$ . Cette valeur assure la condition d'égalité des courants de court-circuit de la cellule solaire supérieure en CGS et la cellule solaire inférieure en CIGS se trouvant dans la cellule solaire tandem en (CGS/CIGS).

Enfin, nous avons étudié l'effet de la température sur les caractéristiques de la cellule solaire tandem optimisée dans l'intervalle de température 300-400 K. A partir des résultats de simulation, nous avons constaté une petite augmentation de la densité de courant de court-circuit, et une diminution linéairement des caractéristiques photovoltaïques (la tension en circuit ouvert, le facteur de forme FF et le rendement de conversion  $\eta$ ) des cellules solaires (supérieure, inférieure, tandem) avec l'augmentation de la température.

**Mots clés:** Modélisation, Cellule solaire, Tandem, CIGS, CGS, Rendement, Température, Tcad Silvaco.

## Abstract

Thin-film solar cells by "Copper Indium Gallium Selenide" ( $\text{CuIn}_{(1-x)}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ ) attract more attention recently in the photovoltaic industry. The single junction CIGS solar cells made up of layers with different energy gaps of 1.2 to 1.3 eV achieved a record conversion efficiency of 20.1%. An increase and improvement of this efficiency is expected mainly by using double junction solar cells (called tandem) to exploit all solar spectrum, this is the purpose of our work. A design and simulation of a CIGS solar cell with double-junction was carried out. The modeling and simulation tool used is the Tcad Silvaco 2D software adapted to study the performance of solar cells based on CIGS single and double-junction.

In the first step of the work, we study the electrical characteristics of thin-film solar cells of ZnO/CdS/CIGS/Mo and ZnO/CdS/CGS/Mo configurations with simple junctions and fixed thicknesses of CIGS and CGS absorbers at 3.5  $\mu\text{m}$  and 0.26  $\mu\text{m}$ , respectively. The electrical characteristics of the current density as function of the voltage  $J$  (V) under AM1.5 illumination are simulated: the conversion efficiencies obtained are 20.32% and 18.92%, respectively. These simulation results are in good agreement with those found experimentally and by simulation reported in the literature. In the second step, we simulated a CGS / CGIS tandem solar cell and the simulation results are: the short-circuit current density  $J_{sc}$  of 16.35  $\text{mA}/\text{cm}^2$ , the open-circuit voltage  $V_{oc}$  of 1.8 V, the fill factor FF of 85.09% and the conversion efficiency  $\eta$  of 25.11%. The simulated efficiency of 25.11% obtained for the non-optimized GGS/CIGS tandem cell is better than that reported in the literature using the Tcad-Silvaco and the AMPS-1D softwares. Then, with fixing the thickness of the bottom CIGS cell at 3.5  $\mu\text{m}$  we varied the thickness of the top CGS cell from 0.1  $\mu\text{m}$  to 0.28  $\mu\text{m}$  in the CGS/CIGS tandem cell. The optimal thickness corresponding to a maximum conversion efficiency of 26.21% is of 0.19  $\mu\text{m}$ . This thickness of the CGS material corresponds well to the location where the photocurrents of the top CGS solar cell, the bottom CIGS solar cell and the CGS/CIGS tandem solar cell are equal.

Finally, we study the effect of the temperature on the characteristics of the optimal tandem solar cell in the temperature range of 300-400 K. From the simulation results, we observed a small increase of the short-circuit current densities, and linear decrease of the photovoltaic characteristics ( $V_{oc}$ , FF,  $\eta$ ) of the solar cells (top, bottom, tandem) with the increase of temperature.

**Key words:** Modeling, solar cell, tandem, CIGS, CGS, efficiency, temperature, Tcad Silvaco

## Liste des symboles

---

$N_C$	Densité effective d'états des électrons dans la bande de conduction	$1/\text{cm}^3$
$N_V$	Densité effective d'états des trous dans la bande de valence	$1/\text{cm}^3$
$n_i$	Concentration intrinsèque	$1/\text{cm}^3$
$E_g$	Gap d'énergie interdite d'un matériau	eV
$N_d$	Concentration des atomes donneurs	$\text{cm}^3$
$N_a$	Concentration des atomes accepteurs	$\text{cm}^3$
$K_B$	Constante de Boltzmann	$\text{eV K}^{-1}$
$T$	Température absolue	K
$\lambda$	Longueur d'onde	$\mu\text{m}$
$I$	Courant de la cellule	A
$I_0$	Courant de saturation	A
$I_{cc}$	Courant de court-circuit	A
$J_{cc}$	Densité du courant de court-circuit	$\text{mA}/\text{cm}^2$
$J_{ph}$	Photo-courant	$\text{mA}/\text{cm}^2$
$V_{co}$	Tension en circuit ouvert	V
FF	Facteur de forme	%
$\eta$	Rendement de conversion	%
$P_{max}$	Puissance maximum	$\text{mw}/\text{cm}^2$
$P_{in}$	Puissance incidente	$\text{mw}/\text{cm}^2$
$\alpha$	Coefficient d'absorption	$1/\text{cm}$
Tr	Coefficient de transmission	%
R	Coefficient de réflexion	%
a, c	Paramètres de maille	nm

---

$\nu$	Fréquence de la radiation	$s^{-1}$
$c$	Vitesse de la lumière	m/s
$E$	Energie du photon	eV
$h$	Constante de Planck	eV.s
$\rho$	Résistivité	$\Omega \cdot cm$
$R_s$	Résistance série	$\Omega$
$R_p$	Résistance parallèle	$\Omega$
$q$	Charge élémentaire d'électrons	C
$\chi_e$	Affinité électronique	eV
$\mu_n, \mu_p$	Mobilité des électrons, trous	$cm^2/Vs$
$R_n, R_p$	Taux de recombinaison des électrons, trous	$cm^{-3}s^{-1}$
$S_n, S_p$	Vitesses de recombinaison en surface des électrons, trous	cm/s
$\sigma_p, \sigma_n$	Section de capture efficace des électrons, trous	$cm^2$
$N_{DG(AG)}$	Densité des états donneurs (accepteurs) de formes gaussiennes	$cm^{-3}$
$E_{A(D)}$	Energie du pic de la gaussienne	eV
$W_G$	largeur de la distribution	eV
QE	Rendement quantique (Quantum efficiency)	%
EQE	Rendement quantique externe	%
IQE	Rendement quantique interne	%

## Liste des abréviations

---

**AM** : Air Mass.

**AM0** : Spectre solaire hors atmosphère.

**AM1.5G** : Spectre solaire terrestre (globale).

**Top-cell** : cellule supérieure.

**Bottom-cell** : cellule inférieure.

**Z.C.E** : Zone de charge d'espace.

**SRH**: recombinaison de type (Shockley-Read Hall).

**CBD** : Dépôt par bain chimique (Chemical Bath deposition).

**DSSC**: dye sensitized solar cell

**MEB**: Microscope Electronique à Balayage (SEM : Scanning Electron Microscopy).

**CIGS** : Sélénure de Cuivre et Indium et de Gallium

**TCO** : oxyde conducteur transparent.

**CdS** : sulfure de cadmium.

**ZnO** : oxyde de zinc.

**a-Si** : Silicium amorphe.

**CdTe** : Tellure de Cadmium.

**AMPS** : Analyse des microélectroniques et structure photonique

**SCAPS** : Simulateur de capacité de la cellule solaire.

**TCAD**: Technology Computer Aided Design.

**SILVACO** : Silicon Valley Corporation.

**matching current condition** : la condition d'égalité des courants

**mismatching current** : inégalité des courants

## Table des matières

ملخص.....	i
Résumé .....	ii
Abstract.....	iii
Liste des symboles .....	iv
Liste des abréviations.....	vi
Table des matières.....	vii
Liste des Figures .....	x
Liste des tableaux .....	xv
Introduction générale.....	2
<b>Chapitre I: Propriétés des matériaux de la cellule solaire à base de CIGS</b>	
I.1. Introduction.....	7
I.2. Introduction aux milieux matériels .....	7
I.2.1. Conducteurs .....	7
I.2.2. Isolants .....	8
I.2.3. Semi-conducteurs.....	8
I.3. Propriétés du matériau CIGS .....	12
I.3.1. Généralités sur les éléments de bases du matériau CIGS .....	12
I.3.2. Structure cristalline et différents alliages dérivés du $\text{CuInSe}_2$ .....	13
I.3.3. Propriétés électriques .....	15
I.3.4. Propriétés optiques.....	16
I.3.5. Influence du Ga.....	19
I.3.6. Les techniques d'élaboration du matériau CIGS .....	20
I.4. Propriétés du sulfure de cadmium CdS.....	22
I.4.1. Choix du CdS.....	22
I.4.2. Structure du CdS .....	23
I.4.3. Propriétés optiques du CdS .....	23
I.4.4. Propriétés physiques du CdS .....	24
I.4.5. Propriétés électriques .....	24
I.5. Oxyde de zinc ZnO .....	25
I.5.1. Propriétés structurales .....	25
I.5.2. Propriétés électriques .....	26
I.5.3. Propriétés optiques.....	27

I.6. Conclusion .....	28
-----------------------	----

## **Chapitre II: Généralités sur les cellules solaires simple à base de CIGS**

II.1. Introduction.....	31
II.2. Rayonnement solaire .....	31
II.3. Génération de porteurs en excès par la lumière.....	33
II.4. Fonctionnement d'une cellule solaire.....	34
II.4.1. La jonction P-N .....	34
II.5. Caractéristiques Electriques d'une cellule solaire .....	36
II.5.1. Caractéristiques (I-V) sous obscurité .....	36
II.5.2. Caractéristiques (I-V) sous illumination.....	37
II.5.3. Rendement quantique et réponse spectrale.....	41
II.6. Différents types de cellules.....	42
II.6.1. Filière silicium.....	42
II.6.2. Filière couches minces.....	43
II.7. Cellules solaires à base de $\text{Cu(In, Ga)Se}_2$ .....	44
II.7.1. Structure de la cellule en CIGS .....	45
II.7.2. Diagramme de bande d'énergie d'une cellule solaire en CIGS.....	50
II.7.3. Principe de fonctionnement physique d'une cellule solaire en CIGS .....	51
II.8. Conclusion .....	53

## **Chapitre III: Cellules solaires à multi-jonctions**

III.1. Introduction .....	55
III.2. Configuration des cellules multijonctions .....	56
III.2.1. Cellule tandem à quatre terminales .....	56
III.2.2. Cellule monolithique tandem à deux terminales .....	57
III.2.3. Cellule monolithique tandem à trois terminales.....	57
III.2.4. Système à décomposition spectrale.....	58
III.3. Principe de la cellule solaire tandem à deux terminales.....	59
III.4. Etude par simulation numérique de cellules solaires tandem à base de CIGS .....	60
III.5. Conclusion.....	66

## **Chapitre IV: Modélisation et simulation numérique des cellules solaires**

IV.1. Introduction .....	68
IV.2. Equations fondamentales du simulateur ATLAS.....	68
IV.2.1. Equation de Poisson .....	69

IV.2.2. Equations de continuité.....	69
IV.2.3. Equations de transport.....	69
IV.2.4. Recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH).....	70
IV.2.5. Recombinaisons surfaciques et au contact.....	71
IV.3. Logiciel de simulation TCAD-SILVACO .....	72
IV.3.1. Simulateur ATLAS .....	74
IV.3.2. Logique de programmation.....	75
IV.4. Conclusion.....	83
<b>Chapitre V: Résultats de simulation numérique et interprétation</b>	
V.1. Introduction .....	85
V.2. Description de la structure de la cellule solaire tandem en CGS/CIGS .....	85
V.3. Modèles physiques .....	86
V.4. Paramètres de la simulation.....	88
V.5. Résultats de la simulation de la cellule solaire en CIGS, CGS et en CGS/CIGS.....	90
V.5.1. Modélisation de la cellule solaire inférieure en CIGS dans ATLAS .....	90
V.5.2. Caractéristique électrique de la cellule solaire supérieure en CGS.....	94
V.5.3. Caractéristique électrique de la cellule solaire tandem en CGS/CIGS .....	96
V.5.4. Effet de l'épaisseur de couche en CGS de la cellule supérieure sur les paramètres photovoltaïques de la cellule tandem .....	100
V.6. Effet de la température sur la cellule solaire .....	106
V.6.1. Dépendance de l'énergie de la bande interdite $E_g$ de la température .....	107
V.6.2. Effet de la température sur la cellule solaire tandem optimisée.....	107
V.6.3. Effet de l'épaisseur en CGS de la cellule supérieure en fonction de la température.....	112
V.7. Conclusion.....	114
<b>Conclusion générale .....</b>	<b>116</b>
<b>Références bibliographiques .....</b>	<b>120</b>
<b>Publications et communications.....</b>	<b>129</b>

## Liste des Figures

---

Figure (a): Meilleurs rendements réalisés par les différentes technologies des cellules solaires au cours des 35-40 dernières années [5]. .....	4
Figure I.1: Structure en bandes d'énergie des matériaux : Isolants, Semi-conducteurs et Métaux. 8	
Figure I.2: Populations des porteurs du semiconducteur intrinsèque et niveau de Fermi. ....	9
Figure I.3: Libération d'un électron par l'atome de phosphore et schéma des bandes. ....	10
Figure I.4: Libération d'un trou par l'atome de bore et schéma des bandes. ....	11
Figure I.5: (a) Structure de la maille élémentaire du zinc-blende, (b) Structure de la maille élémentaire de la chalcopyrite du $\text{CuInSe}_2$ . ....	13
Figure I.6: Evolution des valeurs de paramètres de maille $a$ et $c$ , et du rapport $c/a$ en fonction du rapport $\text{Ga}/(\text{Ga}+\text{In})$ pour $\text{Cu}(\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x)\text{Se}_2$ [30]. ....	14
Figure I.7: Bande interdite $E_g$ en fonction de la constante de réseau $a$ des éléments $\text{CuInSe}_2$ , $\text{CuGaSe}_2$ , $\text{CuInS}_2$ et $\text{CuGaS}_2$ . ....	15
Figure I.8: Coefficient d'absorption de $\text{CuInSe}_2$ et $\text{CuIn}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{Se}_2$ en fonction de longueur d'onde[20]. ....	17
Figure I.9: Variation de l'énergie du gap de $\text{CuInSe}_2$ en fonction de la température[34]. ....	18
Figure I.10: Indice de réfraction complexe de $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ [36]. ....	19
Figure I.11: Variation de la concentration des défauts en fonction de la bande interdite [37]. ....	20
Figure I.12: Schéma d'un procédé de co-évaporation en ligne pour la synthèse de couches minces de CIGS à partir de sources élémentaires Cu, In, Ga et Se. ....	21
Figure I.13: Procédure du dépôt de CIGS en trois étapes par co-évaporation. ....	21
Figure I.14: Structures du CdS et paramètres de mailles des réseaux cubique (a) et hexagonal (b) pouvant être adoptés par le CdS[40]. ....	23
Figure I.15: La structure cristallographique du ZnO de type wurtzite avec les paramètres de maille : $a = 3.250$ et $c = 5.207$ . ....	25
Figure I.16: Transmission, réflexion, et absorption mesurées en fonction de la longueur d'onde pour ZnO [51]. ....	28
Figure II.1: Les spectres solaires AM0, AM1.5G (Global) et AM1.5D (Direct), obtenus par le standard ASTM G173-031[54]. ....	32
Figure II.2: Spectre solaire et la réponse des matériaux en CIGS. ....	33
Figure II.3: Diagramme énergétique des semi-conducteurs de type P et N avant (a), et après (b) mise en contact, présentant la position des bandes de valence (BV), des bandes de	

conduction (BC), des niveaux de Fermi ( $E_F$ ) et des largeurs de bande interdite ( $E_g$ ). La différence de potentiel entre les deux semi-conducteurs ( $V_{eq}$ ) est proportionnelle à l'écart entre leur bande de conduction ( $E_{c1} - E_{c2}$ ).....	34
Figure II.4: Diagramme énergétique d'une jonction P-N lors d'une polarisation directe (a) et inverse (b). .....	35
Figure II.5: Diagramme énergétique d'une jonction P-N sous éclairement, en situation de circuit-ouvert. 1) Création d'une paire électron-trou ; 2) Séparation des charges par la jonction P-N ; 3) Collecte des porteurs. ....	36
Figure II.6: Le circuit équivalent d'une pile solaire idéale (lignes continus). Des composants Non-idéaux sont montrés par les lignes en pointillée. ....	37
Figure II.7: Caractéristiques I(V) à l'obscurité et sous éclairement d'une cellule photovoltaïque. ....	38
Figure II.8: (a) Effet de la résistance série, (b) Effet de la résistance parallèle. ....	40
Figure II.9 : Courbe J(V) sous obscurité d'une cellule en CIGS en échelle semi-log. La courbe en pointillés gris représente le même dispositif sans les résistances parasites (loi de Shockley). Les pointillés noirs verticaux délimitent les domaines dominés par les différents composants : résistance parallèle ( $R_{sh}$ ), diode (D) et résistance série ( $R_s$ )[58].....	41
Figure II.10: Rendements de conversion des différentes technologies de cellules solaires en couche mince en cellule et en module [9].....	44
Figure II.11: (a) schéma de l'empilement des différentes couches d'une cellule en CIGS, (b) image de la tranche d'une cellule en CIGS obtenue par un microscope électronique à balayage (MEB)[61].....	46
Figure II.12: Rendements de conversion ( $> 9\%$ pour une surface de la cellule $\leq 1\text{cm}^2$ ) rapportés [60] sur plusieurs couches tampons des cellules solaires à base de CIS/CIGS et CdTe obtenues par des techniques de dépôt variées. ....	49
Figure II.13: Diagramme de bande d'énergie d'une cellule en CIGS/CdS/ZnO.....	51
Figure II.14 : Caractéristique J-V mesurée d'une cellule solaire en CIGS pour trois énergies de bande interdite [73]. ....	52
Figure II.15: Rendement quantique externe mesuré sur une cellule en CIGS pour différentes proportions $x$ de Ga [74]. ....	53
Figure III.1: Principe de la cellule multi-jonctions. ....	55
Figure III.2: Structure des cellules solaires tandem à quatre terminales : (a) schéma de principe, (b) exemple sur CdSe ou CdZnTe/CIGS[80].....	56
Figure III.3: Structure d'une cellule solaire monolithique tandem à deux terminales : (a) Schéma de principe[79], (b) Exemple sur cellule solaire CGS /CIGS[81]. ....	57

Figure III.4: Structure d'une cellule solaire monolithique tandem à trois terminales[79] .....	58
Figure III.5: Principe de la décomposition spectrale par miroir dichroïque guidant deux parties séparées du spectre lumineux et appliquées sur deux cellules solaires.....	58
Figure III.6 : Principe d'une cellule solaire tandem .....	59
Figure III.7: Construction du diagramme $J-V$ pour une cellule solaire tandem [79]. .....	60
Figure III.8: (a) Les courbes $J-V$ simulées de la cellule supérieure en CGS et la cellule inférieure en CIGS de la cellule tandem en CGS/CIGS empilées mécaniquement. (b) La performance d'une cellule tandem en CGS/CIGS en fonction de l'épaisseur de l'absorbeur de la cellule supérieure en CGS. ....	61
Figure III.9: Schéma d'une cellule solaire tandem à deux contacts avec jonction tunnel à base de CZT/CIGS.....	62
Figure III.10: (a) Schéma d'une cellule solaire en CdS/CIGS simulée dans APSYS. (b) Caractéristique $J(V)$ de la cellule solaire en CIGS. ....	62
Figure III.11: (a) Caractéristiques $(I-V)$ pour les cellules solaires : supérieure et inférieure et tandem en CZT/CIGS dans le cas nom optimal. (b) Densités de courant de court-circuit des cellules supérieure en CZT et inférieure en CIGS en fonction de l'épaisseur de la couche inférieure en CIGS dans des cellules solaires tandem. (c) Caractéristiques $I-V$ pour les cellules solaires : supérieure et inférieure et tandem en CZT/ CIGS dans le cas optimal. (d) EQE de la cellule solaire tandem en CZT/CIGS en fonction de la longueur d'onde. ....	63
Figure III.12: Schéma d'une cellule solaire à double jonction simulée.....	64
Figure III.13: (a) Caractéristiques $(J-V)$ en fonction de gap d'énergie $(E_g)$ qui varie entre 1.0 eV a 1.7 eV; (b) différents résultats de simulation de rendement en fonction de gap d'énergie $(E_g)$ [82].....	65
Figure III.14: Caractéristiques $(J-V)$ de la cellule solaire tandem (CIS/CIGS) (a) : $E_{gtop} = 1.6$ eV, $E_{gbottom} = 1.2$ eV, (b) : $E_{gtop} = 1.7$ eV, $E_{gbottom} = 1.2$ eV.....	66
Figure IV.1: Différents outils de TCAD-SILVACO.....	72
Figure IV.2: Editeur DECKBUILD du Logiciel TCAD-SILVACO. ....	73
Figure IV.3: Fenêtre d'information (l'exécution, les résultats) .....	73
Figure IV.4: Types d'informations de l'entrée et de la sortie du simulateur ATLAS [24].....	74
Figure IV.5: Ordre des groupes de commandes fondamentales dans le logiciel ATLAS [24]. ....	75
Figure IV.6: Maillage à deux dimensions de la cellule solaire à base de CIGS .....	76
Figure IV.7: Définition des régions et des matériaux de la cellule solaire à base de CIGS.....	77
Figure IV.8: Définition des électrodes de la cellule solaire à base de CIGS. ....	78
Figure IV.9: Définition de dopage de la cellule solaire à base de CIGS.....	78

Figure IV.10: Courbe I(V) d'une cellule solaire à base de CIGS obtenue dans Tonyplot du logiciel ATLAS.....	83
Figure V.1: Schéma de la structure de la cellule solaire tandem simulée, avec la cellule supérieure en CGS et la cellule inférieure en CIGS connectées par l'oxyde conducteur transparent en ZnO [84].....	85
Figure V.2: Maillage de la structure de la cellule solaire en CIGS.....	91
Figure V.3: Structure bidimensionnelle d'une cellule solaire seule à base de CIGS.....	92
Figure V.4: Courbe I-V de cellules certifiées de record mondial (par Fraunhofer ISE le 15 avril et 30 juin 2010) d'efficacité 20.1% (surface de la cellule ( $0.5028 \pm 0.0015$ ) $cm^2$ ) et 20.3% (surface de la cellule ( $0.5015 \pm 0.0063$ ) $cm^2$ ) [3]. .....	92
Figure V.5: Caractéristique J(V) de la cellule solaire inférieure en CIGS.....	93
Figure V.6: Structure bidimensionnelle d'une cellule solaire supérieure à base de CGS.....	94
Figure V.7: Maillage de la structure de la cellule solaire supérieure en CGS. ....	95
Figure V.8: Caractéristique J(V) de la cellule solaire supérieure en CGS.....	95
Figure V.9: Structure bidimensionnelle d'une cellule solaire tandem en CGS/CIGS .....	97
Figure V.10: Maillage de la structure de la cellule solaire tandem en CGS/CIGS.....	97
Figure V.11: Caractéristiques (J-V) pour la cellule tandem en CGS/CIGS, la cellule inférieure en CIGS et la cellule supérieure en CGS.....	98
Figure V.12: Rendement quantique externe (EQE) de la cellule solaire tandem en fonction de la longueur d'onde.....	100
Figure V.13: Densités de courant de court-circuit des cellules supérieure en CGS et inférieure en CIGS en fonction de l'épaisseur de la couche supérieure en CGS dans la cellule tandem en CGS/CIGS.....	101
Figure V.14: Tensions en circuit ouvert de cellule supérieure en CGS et inférieure en CIGS en fonction de l'épaisseur de la couche supérieure en CGS dans la cellule solaire tandem en CGS/CIGS.....	102
Figure V.15: La densité de courant de court-circuit $J_{cc}$ de la cellule solaire tandem en CGS/CIGS en fonction de l'épaisseur de la couche en CGS.....	103
Figure V.16: La tension en circuit ouvert $V_{co}$ de la cellule solaire tandem en CGS/CIGS en fonction de l'épaisseur de la couche en CGS. ....	103
Figure V.17: le facteur de forme $FF$ de la cellule solaire tandem en CGS/CIGS en fonction de l'épaisseur de la couche en CGS. ....	104
Figure V.18: Le rendement de conversion $\eta$ de la cellule solaire tandem en CGS/CIGS en fonction de l'épaisseur en CGS.....	105

Figure V.19: Caractéristiques (J-V) pour les cellules solaires supérieure en CGS, inférieure en CIGS et tandem en CGS/CIGS. ....	106
Figure V.20: Effet de la température sur l'énergie de la bande interdite des deux matériaux CGS et CIGS.....	107
Figure V.21: Effet de la température sur les caractéristiques (J-V) de la : (a) cellule supérieure en CGS, (b) cellule inférieure en CIGS et (c) cellule tandem en CGS/CIGS.....	108
Figure V.22 : Effet de la température sur les paramètres des cellules solaires inférieure en CIGS, supérieure en CGS et tandem en CGS/CIGS :(a) $J_{cc}$ , (b) $V_{co}$ , (c) FF, (d) $\eta$ .....	110
Figure V.23 : La densité de courant de court-circuit des cellules supérieure et inférieure en fonction de l'épaisseur de la couche en CGS dans la cellule tandem en CGS/CIGS pour différentes températures 300K – 400K. ....	112
Figure V.24: Simulation de paramètres photovoltaïques de la cellule solaire tandem en CGS/CIGS a variation de la température en fonction de l'épaisseur de la couche en CGS : (a) courant de court-circuit $J_{cc}$ , (b) tension en circuit ouvert $V_{co}$ , (c) facteur de forme FF et (d) rendement $\eta$ pour différentes températures.....	113

## Liste des tableaux

---

Tableau I.1: Propriétés physiques et chimiques des éléments Cu, In, Ga et Se.....	12
Tableau I.2 : La classification périodique des éléments constituant la famille I-III-VI <sub>2</sub> .....	13
Tableau I.3: Type de conduction dans CuInSe <sub>2</sub> en fonction des rapports $SeCu + InetCuIn$ .....	16
Tableau I.4: Quelques propriétés physiques du sulfure de cadmium [45]. .....	24
Tableau I.5: Paramètres du sulfure de cadmium (CdS) à 300 K.....	25
Tableau I.6: Récapitulatif des caractéristiques de la structure cristalline de l'oxyde de zinc (ZnO).....	26
Tableau I.7: Quelques propriétés électriques de ZnO.....	27
Tableau I.8: Quelques propriétés optiques de ZnO[50]. .....	28
Tableau II.1: Caractéristiques des différents substrats utilisés dans le monde pour le CIGS. ....	46
Tableau III.1 : les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire en CdS/CIGS simulés avec différents valeurs de gap d'énergie $E_g$ [80]. .....	65
Tableau V.1: Paramètres de matériaux utilisés dans la simulation. ....	89
Tableau V.2: Paramètres de la simulation des densités d'états de défauts et sections de capture d'électrons (trous). A et D désignent les défauts accepteurs et donneurs. ....	89
Tableau V.3: Paramètres de la simulation des vitesses de recombinaison en surface des électrons ( $S_n$ ) et des trous ( $S_p$ ). .....	89
Tableau V.4: Résultats de simulation et expérimentale pour une cellule solaire simple à base de CIGS.....	94
Tableau V.5: Les paramètres et caractéristiques d'une cellule solaire supérieure en CGS. ....	96
Tableau V.6: Paramètres photovoltaïques des cellules solaires (supérieure, inférieure et tandem). .....	99
Tableau V.7: Les paramètres et caractéristiques de la cellule solaire tandem en CGS/CIGS dans le cas d'égalité des courants.....	106
Tableau V.8 : Le coefficient de température (TC) des paramètres PV ( $J_{sc}$ , $V_{co}$ , $FF$ , $\eta$ ) des cellules solaires supérieure en (CGS), inférieure en (CIGS) et tandem en (CGS/CIGS). ...	111

# **Introduction générale**

## **Introduction générale**

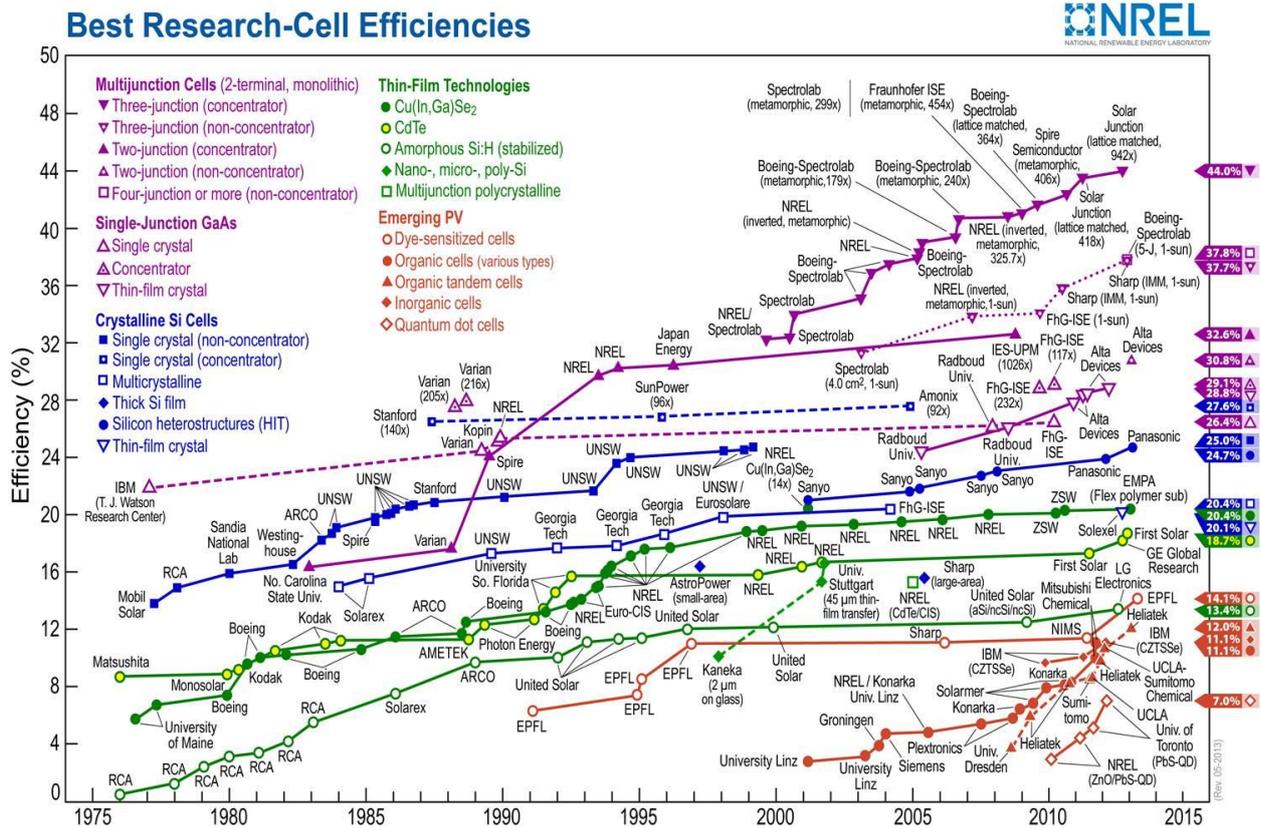
Les cellules solaires en couches minces ont des applications photovoltaïques terrestres à grande échelle vu leur faible prix de fabrication. Un certain nombre de semi-conducteurs comprenant le CdTe polycristallin, le diséléniure de cuivre d'indium galium CIGS et le silicium amorphe (a-Si) ont été élaborés pour les cellules solaires en couches minces.

Le CIGS est un semi-conducteur ayant un gap d'énergie approprié et un coefficient d'absorption optique élevé dans le domaine visible du spectre solaire. Le coefficient d'absorption de films en CIGS est 100 fois plus grand que celui du Si dans le domaine visible du spectre solaire. En outre, les cellules solaires en couches minces à base du CIGS présentent une excellente stabilité, une grande résistance aux rayonnements [1-2], et atteignent le rendement le plus élevé par rapport à d'autres chalcopyrites et aux cellules solaires en CdTe et a-Si:H en couches minces. Une cellule solaire en couche mince à base de CIGS à une seule jonction avec une surface active de  $0.5 \text{ cm}^2$  a montré le plus haut rendement de 20.3% au Centre de l'énergie solaire et de la recherche en hydrogène Baden-Württemberg (ZSW) [3] et 19.9% au Centre de l'énergie solaire et de la recherche (NREL)[4]. Les cellules solaires en couche mince à jonction simple présentent des avantages en raison de son faible coût [5] et de son rendement élevé [6] par rapport aux autres cellules solaires, mais leur rendement de conversion est limitée par la limite Shockley Queisser [7]. L'amélioration de leur rendement nécessite l'utilisation des configurations en multi-jonction [8]. Les cellules solaires cristallines à multi-jonction atteignent le rendement record du monde[9], mais elles sont coûteuses à produire en raison de la croissance épitaxiale coûteuse [10]. Il serait alors souhaitable d'utiliser des cellules solaires multi-jonction à base de couches minces polycristallines peu coûteuses telles que le CdTe et le CIGS.

Le gap d'énergie des films en  $\text{CuIn}_{(1-x)}\text{Ga}_x\text{Se}_2$  (CIGS) varie entre 1.04 eV et 1.68 eV avec la proportion de Ga correspondante allant de 0 à 1[11]. Le CIGS est donc un candidat privilégié pour l'application dans des cellules solaires multi-jonctions. Une augmentation de ce rendement est prévue principalement en utilisant des cellules solaires double jonction (dénommées tandem), constituées de couches avec différentes énergies de bande afin d'exploiter différentes régions énergétiques du spectre solaire. Les cellules solaires tandem se composent d'une cellule supérieure à large bande, qui absorbe la partie à faible longueur d'onde (énergie élevée) du spectre solaire et une cellule inférieure à faible bande absorbant la gamme de longueurs d'ondes plus longues. La cellule supérieure doit être transparente au-dessous de la bande d'énergie de

l'absorbeur et reliée à la cellule inférieure via une couche conductrice transparente. Pour les cellules solaires CIGS, MoSe<sub>2</sub> sur ZnO, SnO<sub>2</sub>: F, In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>: Sn et ZnO peuvent être utilisés comme matériaux de connexion car ils établissent de bons contacts ohmiques avec l'absorbeur CIGS. Lorsque deux cellules solaires sont empilées de manière monolithique, une jonction p-n polarisée en inverse se forme à leur interface et la jonction tunnel est typiquement utilisée entre les deux cellules pour résoudre ce problème de polarisation inverse. Dans ce contexte, la modélisation et la simulation d'une cellule solaire tandem CGS/CIS avec une jonction tunnel p-Cu<sub>2</sub>O/n-In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ont un rendement de 24.1% [12]. Le rendement obtenu par la simulation d'une cellule tandem CGS/CIGS était de 25% [13] et pour une cellule tandem CdZnTe/CIGS, son rendement était de 26% [14]. La simulation d'une cellule tandem hybride organique/inorganique de faible coût de fabrication montre un rendement supérieur à 20% comme rapportée dans [15]. Le développement des cellules tandem intégrées de manière mécanique et monolithique utilisant comme cellule solaire inférieure en CIGS et comme cellule solaire supérieure à colorant ("dye-sensitized solar cell (DSSC)"), avec différentes méthodes pour augmenter la transmittance de la cellule supérieure à colorant est également un thème de recherche important [16]. La cellule tandem DSSC/CIGS a d'abord été réalisée par "Gratzel", ce qui a permis d'obtenir un rendement de conversion supérieure à 15% [17], 12.35% [18] et 10.46% [19]. La cellule solaire tandem emploie deux sous-cellules (supérieure et inférieure) connectées dans une structure en série. Lorsque cette configuration en série est utilisée, la tension de circuit ouvert  $V_{co}$  de la cellule tandem est égale à la somme des  $V_{co}$  de chaque sous-cellule [20]. Les cellules tandem empilées mécaniquement basées sur Ag(In,Ga)Se<sub>2</sub> (AIGS) comme cellule supérieure et CIGS en tant que cellule inférieure présentent une tension de circuit ouvert plus élevées que 1.5V [21]. Avec le CIGS représentant la cellule inférieure, la bande d'énergie de la cellule CuGaSe<sub>2</sub> (CGS) de 1.68 eV satisfait idéalement les exigences de former avec la cellule CIGS une cellule tandem CGS/CIGS idéale. La connexion de la cellule tandem CGS/CIGS en série peut atteindre une tension de circuit ouvert élevée de 1.18 V avec un rendement de conversion de 7.4% [22]. On a supposé que la densité de courant de la cellule tandem en série est limitée par la plus faible densité de courant de la cellule supérieure et inférieure et que la densité de courant entre les sous-cellules peut induire une perte de courant significative dans la cellule tandem [23].

Les progrès rencontrés au cours des 35-40 dernières années dans la réalisation des différentes générations de cellules solaires sont représentés dans la figure (a).



**Figure (a) : Meilleurs rendements réalisés par les différentes technologies des cellules solaires au cours des 35-40 dernières années [5].**

La simulation numérique est un outil puissant et beaucoup de paramètres peuvent être variés pour modéliser les phénomènes expérimentalement observés. Elle peut également offrir une explication physique des phénomènes observés puisqu'elle permet de calculer les paramètres internes tels que le taux de recombinaison et les densités des porteurs libres.

Dans ce travail, nous avons utilisé le logiciel Silvaco-Atlas [24] dans la conception et l'étude des cellules solaires simple jonction à base de CIGS et CGS et double jonction à base de CGS/CIGS. L'outil Atlas permet de concevoir et prévoir les performances des dispositifs à base de semi-conducteurs et les cellules solaires. Ce travail contribuera à une meilleure compréhension et analyse des cellules solaires en CIGS. Dans la première étape, nous avons effectué une modélisation et une simulation numérique des cellules solaires simple jonction à base de CGS et CIGS et la comparaison des résultats trouvés aux résultats expérimentaux et simulation rapportés dans la littérature. Dans la deuxième étape, nous montrerons les résultats de la simulation de la cellule solaire tandem en CGS/CIGS avec le CGS comme absorbeur de la cellule supérieure et le CIGS comme absorbeur de la cellule inférieure.

La cellule solaire tandem en CGS/CIGS a montré une amélioration de la performance photovoltaïque par rapport aux cellules solaires simple jonction en CGS et CIGS. Le point de l'égalité entre les courants des cellules supérieure et inférieure ("current matching") a été considéré comme la condition préalable à l'optimisation de la performance de la cellule tandem CGS/CIGS avec un rendement maximal. Ceci a été obtenu en ajustant l'épaisseur de l'absorbeur de CGS à une valeur optimale où les densités de courant de court-circuit des cellules supérieure, inférieure et tandem sont similaires. Le rôle de ("current matching") dans l'amélioration de la performance de la cellule tandem en CGS/CIGS a été simulé et analysé.

Enfin, nous avons étudié l'effet de la température sur les caractéristiques de la cellule solaire tandem optimisée dans l'intervalle de température 300-400 K.

## **Organisation de la thèse**

Cette thèse est structurée de la façon suivante :

**Chapitre I :** nous allons présenter les propriétés physiques des semi-conducteurs en CIGS, CGS, CdS et ZnO constituant la cellule solaire de notre thème de recherche.

**Chapitre II :** nous donnerons une étude théorique sur les cellules solaires en général et les cellules solaires simples en CIGS et CGS en particulier. Nous décrirons le principe de fonctionnement et les caractéristiques électriques de ces cellules solaires.

**Chapitre III :** nous présenterons une étude sur les cellules solaires à multijonctions incluant les cellules double jonction à base de semi-conducteur (I-III-VI<sub>2</sub>), leurs avantages et leurs limites ainsi que quelques travaux de modélisation effectués sur les cellules solaires double jonction en CGS/CIGS et CdZnTe/CIGS.

**Chapitre IV :** nous présenterons les modèles physiques des cellules solaires et logiciel TCAD-Silvaco utilisé pour la simulation.

**Chapitre V :** nous étudierons par simulation numérique les cellules solaires simple jonction en CGS et CIGS et la cellule solaire double jonction en CGS/CIGS par le simulateur Atlas Silvaco dans le but de déterminer leurs caractéristiques électriques et leurs paramètres photovoltaïques. Nous allons aussi étudier l'influence de l'épaisseur de la couche supérieure (CGS) sur les paramètres photovoltaïques ( $J_{cc}$ ,  $V_{co}$ ,  $FF$ ,  $\eta$ ) de la cellule solaire double jonction dans le but de l'optimisation de la cellule tandem en CGC/CIGS. Enfin, nous allons étudier l'effet de la température sur les caractéristiques de la cellule solaire tandem optimisée dans l'intervalle de température de 300 à 400 K. Une discussion et une interprétation des résultats sont aussi incluses dans ce chapitre.

Nous clôturerons le travail par une conclusion sur l'ensemble des résultats obtenus ainsi que des perspectives à ce travail.

**Chapitre I: Propriétés des matériaux de la cellule solaire à  
base de CIGS**

## **I.1. Introduction**

Dans le monde, il y'a plusieurs laboratoires de recherche qui conduisent des travaux sur les semi-conducteurs chalcopyrites pour comprendre les propriétés électroniques, structurales, élastiques, mécaniques et optiques de ces matériaux. Ceci revient à leurs propriétés optiques et électroniques intéressantes qui peuvent être exploitées dans l'élaboration des composants optoélectroniques telles que les cellules solaires et les détecteurs photovoltaïques.

Le CIGS appartenant à la famille chalcopyrite possède des propriétés électroniques, électriques et optiques intéressantes. La bande interdite est de nature directe et son coefficient d'absorption est très élevé dans la gamme du spectre solaire. Le composé CIGS est considéré comme matériau semi-conducteur important pour les applications optoélectroniques et photovoltaïques.

Une cellule solaire en CIGS est constituée par la déposition successive de plusieurs matériaux en couches minces sur un substrat. Dans ce chapitre nous allons présenter les propriétés physiques des semi-conducteurs en CIGS, CdS et ZnO constituant la cellule solaire à base de CIGS.

Le rendement de conversion photovoltaïque dans les cellules solaires photovoltaïques en CIGS dépend largement des propriétés des matériaux qui la constituent. La bonne compréhension des matériaux constituant la cellule solaire à base du CIGS est donc nécessaire dans le but d'optimiser cette cellule.

## **I.2. Introduction aux milieux matériels**

Selon les propriétés électriques, les matériaux sont classés en trois catégories, conducteurs, isolants et semi-conducteurs, voir Figure (I.1).

### **I.2.1. Conducteurs**

Les métaux tels que le fer (Fe), le cuivre (Cu), l'or (Au), l'argent (Ag) et l'aluminium (Al) sont des conducteurs de courant électrique. La présence d'électrons libres dans la couche périphérique (densité  $n \approx 10^{22}$  à  $10^{23}$  é/cm<sup>3</sup>) est à l'origine de la conductivité électrique. A température ambiante la résistivité  $\rho$  des conducteurs est très faible ( $\rho \leq 10^{-5}$   $\Omega$ . cm).

## I.2.2. Isolants

Les matériaux qui ont une résistivité  $\rho$  supérieure à  $10^8 \Omega \cdot \text{cm}$  sont des isolants (matériaux non conducteurs de courant électrique). Parmi ces matériaux : le verre, le mica, la silice ( $\text{SiO}_2$ ) et le carbone (Diamant). La conductivité des isolants est donc très faible ( $\sigma = 1/\rho$ ).

## I.2.3. Semi-conducteurs

Cette classe de matériaux se situe entre les métaux (conducteurs) et les isolants (non conducteurs). La résistivité  $\rho$  varie de  $10^{-3}$  à  $10^4 \Omega \cdot \text{cm}$ . La conduction électrique se fait par les électrons et les trous, ou de façon préférentielle par l'un ou l'autre type de porteurs. Un semi-conducteur peut être soit pur (intrinsèque), soit dopé par des impuretés (extrinsèque) qui permettent de contrôler sa résistivité. Si on prend, par exemple, du Silicium assez pur et qu'on lui ajoute un atome de Bore ou de Phosphore pour  $10^5$  atomes de Silicium, sa résistivité passe de  $10^3$  à environ  $10^{-2} \Omega \cdot \text{cm}$ . Dans la figure I.1 sont représentées les structures des bandes d'énergie de l'isolant, le semi-conducteur et le métal.

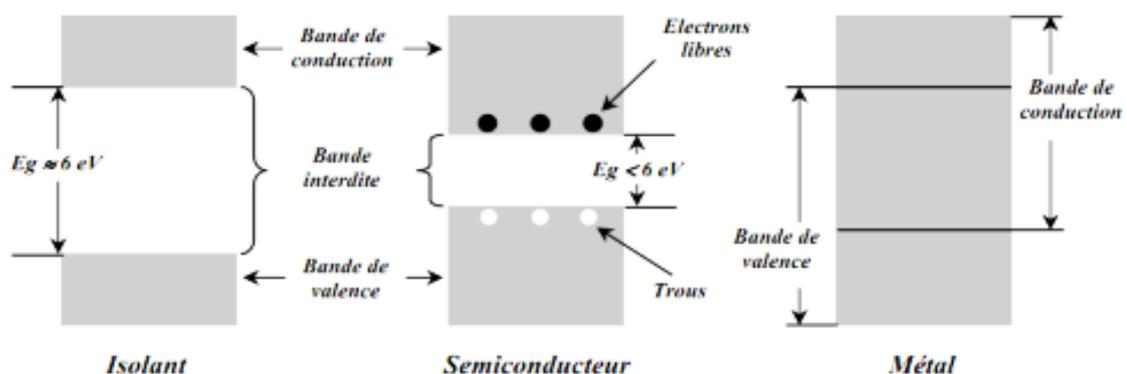


Figure I.1: Structure en bandes d'énergie des matériaux : Isolants, Semi-conducteurs et Métaux.

### I.2.3.1. Semi-conducteurs intrinsèques

Ce sont des semi-conducteurs très purs et très bien cristallisés (présentant un réseau cristallin parfaitement périodique) et ayant un taux d'impuretés très faible (moins d'un atome d'impureté pour  $10^{13}$  atomes de l'élément semi-conducteur). Ils se comportent comme des isolants à très basse température et leurs conductivités augmentent avec la température. A température constante, un équilibre s'établit (Figure.I.2) entre les phénomènes d'ionisation thermique et de recombinaison; les électrons libres et les ions de silicium apparaissant en

quantités égales. La concentration en électrons libres  $n$  et en trous libres  $p$  sont égales à  $n_i$  la concentration intrinsèque [25].

Les densités totales ( $n$  électrons.  $\text{cm}^{-3}$  dans la bande de conduction et  $p$  trous.  $\text{cm}^{-3}$  dans la bande de valence) s'exprime selon les lois :

$$n = N_C \exp\left(-\frac{\Delta E_n}{kT}\right) \quad p = N_V \exp\left(-\frac{\Delta E_p}{kT}\right) \quad \text{I. 1}$$

où  $N_C$  et  $N_V$  sont respectivement la densité effective d'états des électrons dans la bande de conduction et la densité effective d'états des trous dans la bande de valence. Ces deux coefficients évoluent avec la température selon une loi en  $T^{3/2}$ .

- $\Delta E_n$  et  $\Delta E_p$  représentent deux différences d'énergies liées à un niveau dit de Fermi qui indique les écarts de population entre les électrons et les trous.

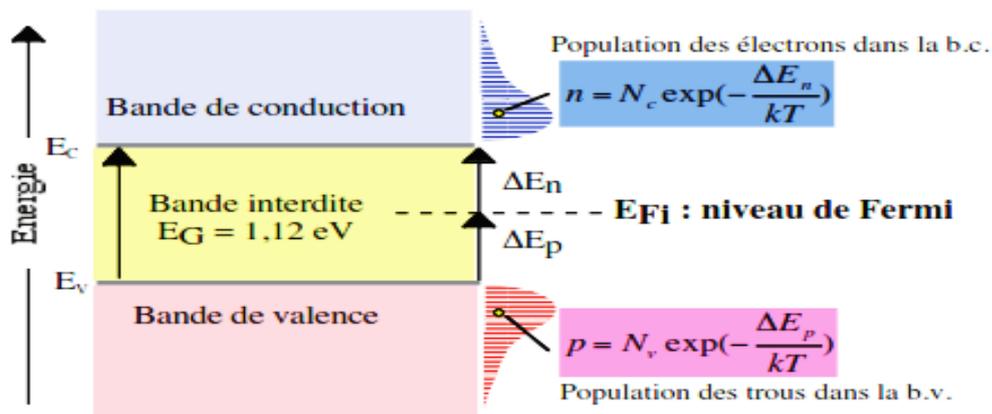


Figure I.2: Populations des porteurs du semiconducteur intrinsèque et niveau de Fermi.

La concentration intrinsèque  $n_i$  en électrons libres et en trous libres par  $\text{cm}^3$  dépend de la hauteur de la bande interdite  $E_g$  et de la température  $T$  selon la loi :

$$n = p = n_i = AT^{\frac{3}{2}} \cdot \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right) \quad \text{I. 2}$$

A : constante du matériau

$E_g$  : Hauteur de la bande interdite (eV)

K : constante de Boltzmann =  $8.6 \times 10^{-5} \text{ eV K}^{-1}$

T : température absolue en K

### I.2.3.2. Semi-conducteurs extrinsèques

Pour augmenter la conductivité des semi-conducteurs et les rendre utilisables, un certain nombre d'impuretés (atomes étrangers) sont introduites dans la structure cristalline. Le processus d'introduction d'impuretés (par diffusion, épitaxie ou implantation ionique) s'appelle dopage, et donne naissance aux semi-conducteurs dopés (ou extrinsèques). L'ordre de grandeur pour le dopage est d'un atome d'impuretés pour  $10^6$  à  $10^9$  atomes de semiconducteurs soit une densité d'impureté de l'ordre de  $10^{19}$  à  $10^{22}$   $\text{cm}^{-3}$ . Ainsi la conductivité du semiconducteur dopé est déterminée par la nature et la concentration en atomes d'impuretés. Ces atomes d'impuretés sont des éléments chimiques de la troisième colonne (groupe III : B, Bore; In, Indium) ou de la cinquième colonne (groupe V : P, Phosphore; As, Arsenic; Sb, Antimoine).

#### a. Semi-conducteurs de type N

On obtient un semi-conducteurs de type N en injectant dans le cristal de silicium des atomes qui possèdent 5 électrons sur leur couche périphérique (phosphore ou arsenic) (figure I.3).

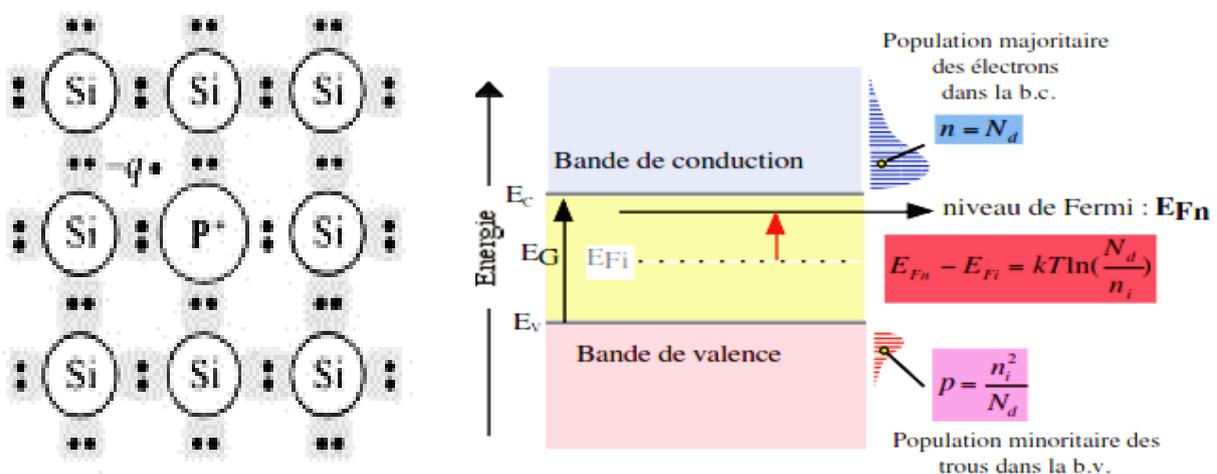


Figure I.3: Libération d'un électron par l'atome de phosphore et schéma des bandes.

A la température ordinaire, la quasi-totalité des atomes donneurs sont ionisés. Si  $N_d$  est la concentration des atomes donneurs, ceux-ci vont libérer  $n = N_d$  électrons libres.

Les concentrations en électrons libres ( $n$ ) et en trous libres ( $p$ ) sont liées par la loi d'action de masse :

$$n \cdot p = n_i^2 \quad \text{I.3}$$

Les électrons sont les porteurs majoritaires et les trous les porteurs minoritaires.

Le niveau indicateur de Fermi  $E_{F_n}$  se déplace donc du milieu de la bande interdite ( $E_{F_i}$ ) vers la bande de conduction de telle manière que :

$$\Delta E_n = KT \cdot \ln\left(\frac{N_d}{n_i}\right) = E_{F_n} - E_{F_i} \quad \text{I.4}$$

### b. Semi-conducteurs du type P

On obtient un semi-conducteurs dopé P en injectant dans le silicium des atomes de la 3<sup>o</sup> colonne (bore, indium) qui possèdent trois électrons périphériques (figure I.4).

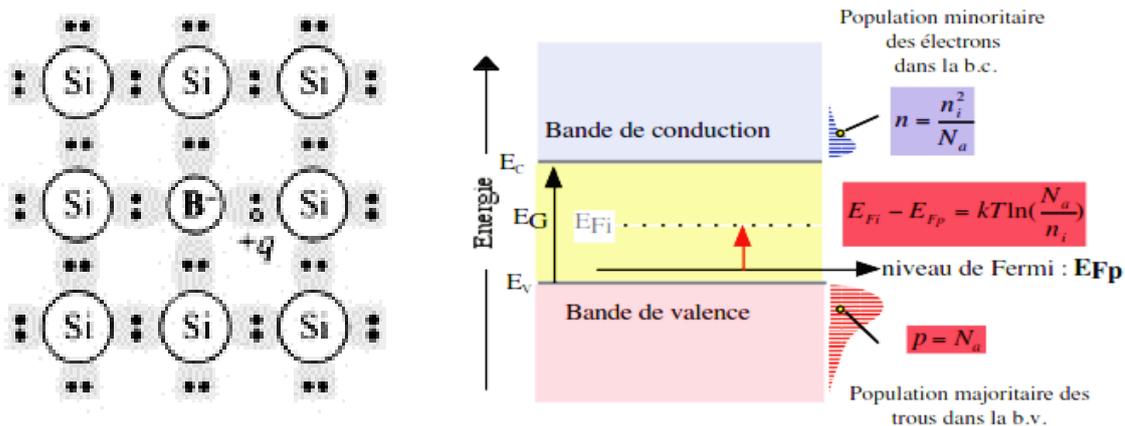


Figure I.4: Libération d'un trou par l'atome de bore et schéma des bandes.

A la température ordinaire, la quasi-totalité des atomes accepteurs sont ionisés. Si  $N_a$  est la concentration par  $\text{cm}^3$  des atomes accepteurs, ceux-ci vont libérer :  $p = N_a$  trous libres.

Les concentrations en électrons libres ( $n$ ) et en trous libres ( $p$ ) sont liées par la loi d'action de masse :

$$n \cdot p = n_i^2 \quad \text{I.5}$$

Les trous sont les porteurs majoritaires et les électrons les porteurs minoritaires. Le niveau indicateur de Fermi  $E_{F_p}$  se déplace du niveau intrinsèque  $E_{F_i}$  vers la bande de valence de telle manière que :

$$\Delta E_p = KT \cdot \ln\left(\frac{N_a}{n_i}\right) = E_{F_i} - E_{F_p} \quad \text{I.6}$$

### **I.3. Propriétés du matériau CIGS**

Le rendement d'une cellule solaire à base de CIGS est fortement dépendant des propriétés du matériau absorbeur. Comme dans le cas d'autres semi-conducteurs, la structure cristalline du CIGS ainsi que sa composition peuvent fortement influencer sur ses propriétés optiques et électroniques. La bonne compréhension des propriétés physiques de ce matériau est donc nécessaire dans le but d'avoir de très bonnes performances d'un dispositif électronique à base de CIGS.

#### **I.3.1. Généralités sur les éléments de bases du matériau CIGS**

La première cellule solaire à base de semiconducteur a été réalisée en 1876 par l'élaboration mécaniquement une couche de sélénium entre deux électrodes. Mais la réalisation des cellules solaires en couches minces à base des matériaux à structures chalcopyrites suite à l'élaboration de cellules photovoltaïques en  $\text{CuInSe}_2/\text{CdS}$  par S. Wagner et al. [26] en 1974, et ces travaux ont abouti à des rendements de 12% à partir d'un monocristallin de  $\text{CuInSe}_2$ . Des paramètres physiques et chimiques des éléments (Cu, In, Ga, Se) utilisés pour l'élaboration des couches  $\text{CuInSe}_2$  et  $\text{Cu(In,Ga)Se}_2$  sont groupés dans le tableau (I.1)[27].

<b>Paramètres</b>	<b>Cu</b>	<b>In</b>	<b>Ga</b>	<b>Se</b>
Masse atomique (g/mol)	63.546	114.82	69.74	78.96
Configuration électronique	[Kr] $3d^{10}4s^1$	[Kr] $3d^{10}5s^25p^1$	[Ar] $3d^{10}4s^24p^1$	[Ar] $3d^{10}4s^24p^4$
Masse volumique à 300 k ( $\text{g/cm}^3$ )	8.96	7.31	5.1	4.79
Température de fusion ( $^{\circ}\text{C}$ )	1083	156	29.78	217
Température d'ébullition ( $^{\circ}\text{C}$ )	2595	2000	2403	688
Conductivité électronique ( $10^6/\text{cm}.\Omega$ )	0.596	0.116	0.0678	$10^{-12}$
Conductivité thermiques ( $\text{W/cm. K}$ )	4.01	0.816	0.0678	0.0204
Potentiel d'ionisation ( $1^{er}$ ) (eV)	7.726	7.786	5.999	9.752
Electronégativité de Pauling	1.9	2	1.81	2.4
Rayon atomique (nm)	0.128	0.162	0.161	0.14

**Tableau I.1: Propriétés physiques et chimiques des éléments Cu, In, Ga et Se.**

Les deux semi-conducteurs chalcopyrites (CGS et CIGS) appartiennent à la première famille qui est composée d'un élément de la 1ère colonne, d'un élément de la 3ème colonne et d'un élément de la 6ème colonne du tableau périodique des éléments chimiques c'est -à-dire I-III-VI<sub>2</sub>.

I	III	VI
	$10.81^5 B$	$15.99^8 O$
	$26.98^{13} Al$	$32.065^{16} S$
$63.546^{29} Cu$	$69.74^{31} Ga$	$78.96^{34} Se$
	$114.82^{49} In$	$127.60^{52} Te$

Tableau I.2 : La classification périodique des éléments constituant la famille I-III-VI<sub>2</sub>.

### I.3.2. Structure cristalline et différents alliages dérivés du CuInSe<sub>2</sub>

#### I.3.2.1. Structure cristalline

Le CuInSe<sub>2</sub> et le CuGaSe<sub>2</sub> sont des matériaux qui forment l'alliage de Cu(In, Ga)Se<sub>2</sub>, appartiennent à la famille I-III-VI<sub>2</sub> qui possède une structure tétragonale de chalcopyrite. Les chalcopyrites basés sur le CuInSe<sub>2</sub> ont une structure cubique zinc blende, également appelée sphalérite comme le ZnSe [28]. Chaque atome de Se est lié tétraédriquement à deux atomes de Cu et d'In, tandis que chaque atome de Cu ou d'In est entouré par quatre atomes de Se. La longueur de la liaison Cu-Se est de 2.43 Å et celle de In-Se est de 2.57 Å, ce qui donne une distorsion tétragonale de l'unité de 0.3% [29]. Dans le cas du CIGS, les sites des atomes du groupe III sont donc occupés par des atomes d'In ou de Ga, dans des proportions dépendant de la composition de l'alliage.

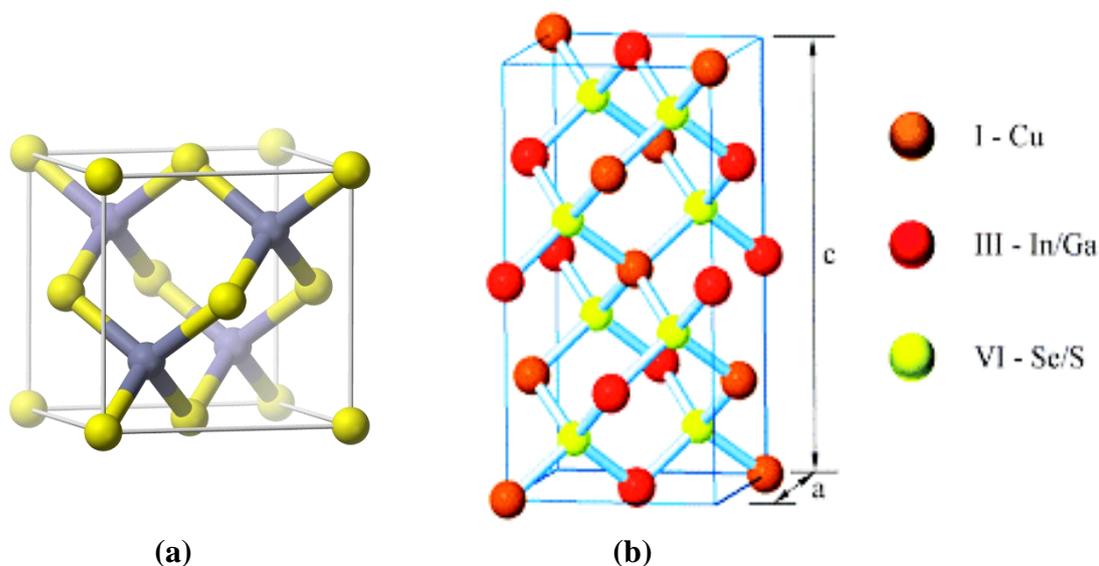
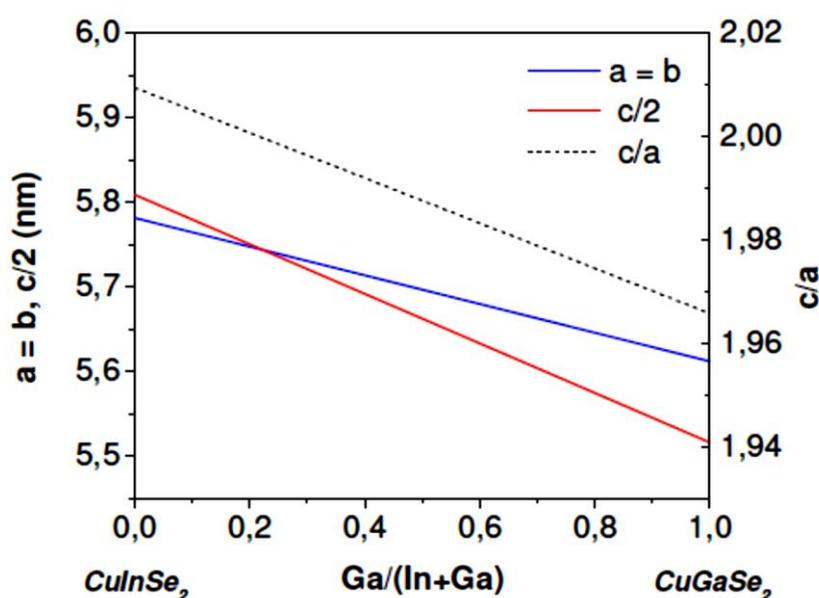


Figure I.5: (a) Structure de la maille élémentaire du zinc-blende, (b) Structure de la maille élémentaire de la chalcopyrite du CuInSe<sub>2</sub>.

### I.3.2.2. Les différents alliages dérivés du CuInSe<sub>2</sub>

Les différents alliages dérivés du CuInSe<sub>2</sub> sont groupés sous le terme Cu (In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>) Se<sub>2</sub> ou  $x = \text{Ga}/(\text{In} + \text{Ga})$  est la composition en Ga représentant le taux d'atomes de gallium qui remplacent les atomes d'indium dans la structure. Les différentes solutions solides quaternaires de type Cu (In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>) Se<sub>2</sub> ont été caractérisées par de nombreux auteurs. L'évolution des paramètres de mailles suit la loi de Vegard, c'est-à-dire que les paramètres évoluent linéairement entre les valeurs des deux ternaires associés. L'évolution des paramètres de maille du quaternaire Cu (In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>) Se<sub>2</sub> est représentée sur la figure (I.6).



**Figure I.6:** Evolution des valeurs de paramètres de maille  $a$  et  $c$ , et du rapport  $c/a$  en fonction du rapport  $\text{Ga}/(\text{Ga}+\text{In})$  pour  $\text{Cu}(\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x)\text{Se}_2$  [30].

Le diagramme présenté sur la figure (I.7), représente l'évolution de la largeur de la bande interdite en fonction du paramètre de maille  $a$  pour les éléments CuInSe<sub>2</sub>, CuGaSe<sub>2</sub>, CuInS<sub>2</sub>, CuGaS<sub>2</sub>. Ce diagramme montre que la largeur de la bande interdite par exemple de 1.04 eV jusqu'à 2.4 eV pour les deux composés CuInSe<sub>2</sub> et CuGaS<sub>2</sub> respectivement, et même 1.67 eV pour le CuGaSe<sub>2</sub>, ainsi, couvrant la plupart du spectre visible.

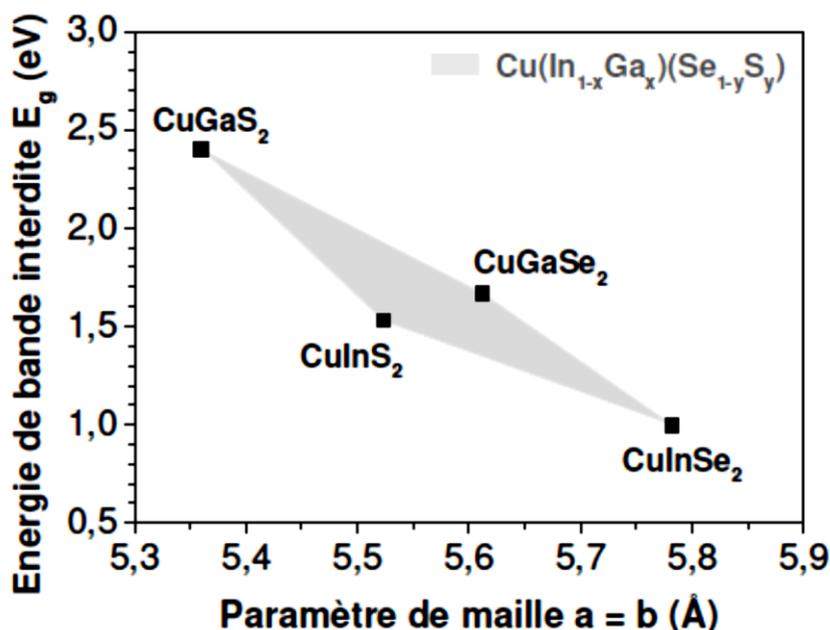


Figure I.7: Bande interdite  $E_g$  en fonction de la constante de réseau  $a$  des éléments CuInSe<sub>2</sub>, CuGaSe<sub>2</sub>, CuInS<sub>2</sub> et CuGaS<sub>2</sub>.

### I.3.3. Propriétés électriques

Les propriétés électriques (mobilité, conductivité...etc.) des matériaux semi-conducteurs utilisés dans les cellules solaires sont en relation avec leurs performances photovoltaïques.

Le CuInGaSe<sub>2</sub> est un matériau intrinsèquement dopé, qui signifie que, lorsque le composé est formé, il prend un dopage de type p provenant de défauts cristallins intrinsèques générant des états accepteurs. Les défauts intrinsèques sont dus aux lacunes de cuivre ( $V_{Cu}$ ) et d'indium ( $Cu_{In}$ ) [31]. Quant aux défauts générant des niveaux donneurs ( $In_{Cu}$  et  $V_{Se}$ ), ils ne sont pas abondants dans le CIGS qui est à l'origine de son dopage de type p.

Selon les rapports Cu/In et Se/(Cu + In), le matériau CuInSe<sub>2</sub> peut être rendu riche en Cu (Cu-riche) ou riche en In (In-riche). Le matériau Cu-riche est fortement conducteur, principalement en raison de la présence des espèces de cuivre de sélénure non réagies, et généralement du type p, dû à une grande concentration des défauts de Cu [31]. Pour le matériau In-riche, il présente une conductivité de type n.

Le tableau (I.3) rassemble les différents types de conductivités que peut avoir le CuInSe<sub>2</sub> en fonction des rapports Cu/In et Se/(Cu + In).

$\frac{Se}{Cu + In} > 1$		$\frac{Se}{Cu + In} < 1$	
$\frac{Cu}{In} > 1$	$\frac{Cu}{In} < 1$	$\frac{Cu}{In} > 1$	$\frac{Cu}{In} < 1$
Type p avec une résistivité faible	Type p avec une résistivité moyenne ou type n avec une résistivité forte	Type p avec une résistivité faible	Type p avec une résistivité forte ou type n avec une résistivité faible

Tableau I.3: Type de conduction dans  $CuInSe_2$  en fonction des rapports  $\left(\frac{Se}{Cu+In}\right)$  et  $\left(\frac{Cu}{In}\right)$ .

### I.3.4. Propriétés optiques

La fraction molaire  $x = Ga/(In + Ga)$  représente le taux d'atomes de gallium qui remplacent les atomes d'indium dans la structure. Le CIGS est un semi-conducteur à gap direct et l'addition du gallium dans la structure cristalline permet de faire varier le gap du matériau entre 1.011 eV et 1.68 eV selon la valeur de la fraction molaire  $x$ .

La largeur de la bande interdite du CIGS varie en fonction de  $x$  entre les valeurs du pur CIS ( $x = 0$ ) et du pur CGS ( $x = 1$ ), suivant la loi suivante [32]:

$$E_g = 1.011 + 0.664x - 0.249x(1 - x) \quad I.7$$

La valeur optimale de  $E_g$  dépend de plusieurs facteurs. Du point de vue de l'absorption des photons, il est préférable d'avoir une valeur de  $E_g$  réduite, permettant d'absorber un spectre plus large (plus grandes longueurs d'onde). Il en résulte un courant plus important délivré par la cellule solaire. Cependant, c'est la valeur de  $E_g$  qui détermine la tension maximale délivrée par la cellule. Afin de maximiser le rendement de conversion, il est donc nécessaire d'obtenir un compromis idéal entre courant et tension.

L'énergie de la bande interdite est liée à la longueur d'onde du photon par [32] :

$$E_g(eV) = \frac{1.24}{\lambda(\mu m)} \quad I.8$$

où  $E_g$  est l'énergie de la bande interdite en électrons volts (eV) et  $\lambda$  est la longueur d'onde de la lumière en micromètres ( $\mu m$ ). La plupart des résultats expérimentaux publiés dans le domaine des cellules CIGS montrent que les meilleurs rendements sont obtenus avec à un taux de Ga proche de 30%.

Si le CIGS est utilisable dans des dispositifs photovoltaïques en couches minces, c'est parce qu'il possède un gap direct. De ce fait, l'absorption des photons ayant une énergie proche du gap ne nécessite pas l'intervention de phonons et il en résulte un coefficient d'absorption optique  $\alpha$  élevé (comparé à un semiconducteur à gap indirect comme le silicium).

Les propriétés optiques des couches absorbeurs  $\text{CuInSe}_2$  ont été largement étudiées par plusieurs groupes de recherche [20]. Le coefficient d'absorption de  $\text{CuInGaSe}_2$ ,  $\text{CuInSe}_2$  est très élevé et supérieur à  $10^5 \text{cm}^{-1}$  dans le domaine du visible et le proche infrarouge (figure. I.8).

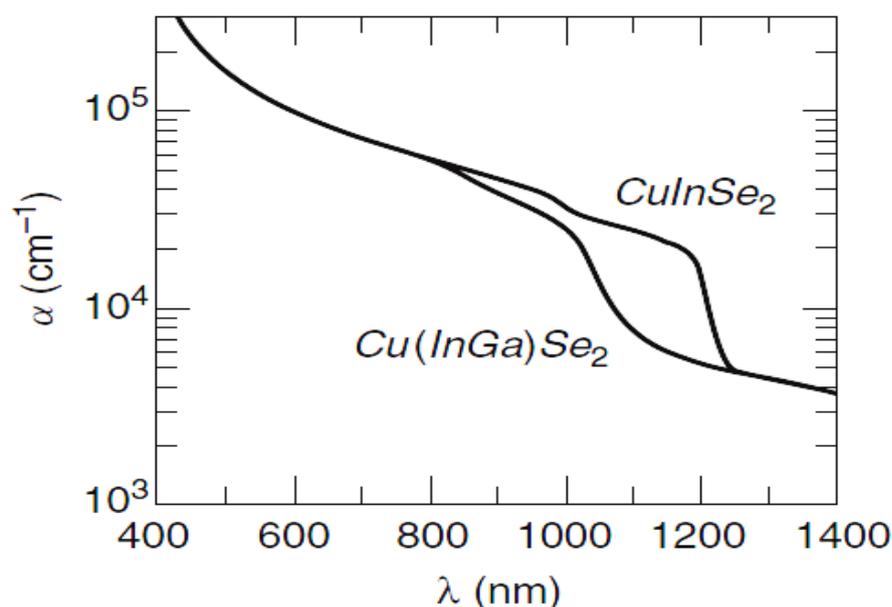


Figure I.8: Coefficient d'absorption de  $\text{CuInSe}_2$  et  $\text{CuIn}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{Se}_2$  en fonction de longueur d'onde[20].

Il a été démontré que le coefficient d'absorption  $\alpha$  en fonction du gap optique  $E_g$  est décrit par [20]:

$$\alpha = \frac{A(E - E_g)^{\frac{1}{2}}}{E} \quad \text{I.9}$$

Avec  $A$ , une constante de proportionnalité, qui dépend des densités des états liés à l'absorption de photon et  $E$  l'énergie de l'irradiation.

Le gap d'énergie de ce semi-conducteur est également une fonction de la température (Figure I.9), il peut être décrit approximativement par la relation proposée par Varshni [33]:

$$E_g(T) = E_g(0) - \left( \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \right) \quad \text{I.10}$$

Où  $E_g(0)$  est le gap à 0 K,  $\alpha$  et  $\beta$  sont des constantes spécifiques à chaque semi-conducteur. Dans le cas du  $\text{CuInSe}_2$ , ils sont respectivement égaux à  $3.6 \times 10^4$  (eV. K<sup>-1</sup>) et 350 K [34]. En général,  $dE_g/dT$  est de l'ordre de  $-2 \times 10^{-4}$  (eV. K<sup>-1</sup>).

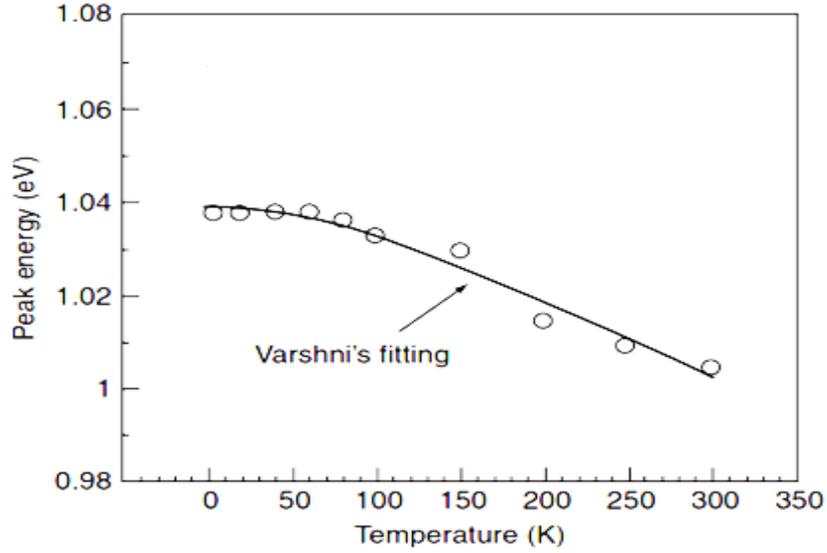


Figure I.9: Variation de l'énergie du gap de  $\text{CuInSe}_2$  en fonction de la température[34].

Des études ont été effectuées sur le  $\text{Cu}(\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x)\text{Se}_2$  pour différentes compositions de  $x = \text{Ga}/(\text{In} + \text{Ga})$  entre 0 à 1. Généralement les propriétés optiques dépendent considérablement de l'indice de réfraction complexe [28,36], ce dernier est donné par la relation suivante :

$$n_e = n - ik \quad \text{I.11}$$

où  $n$  est l'indice de réfraction et  $k$  le coefficient d'extinction, ces paramètres ont été étudiés pour le cas d'un monocristal et des couches minces en utilisant la technique d'ellipsométrie et d'angle d'indice multiples et les mesures de transmission-réflexion à indice normal [29, 35].

Les courbes de la figure (I.10) décrivent l'indice de réfraction complexe,  $n - ik$ , pour  $x = 0$  à 1.

On peut utiliser l'indice de réfraction pour calculer d'autres paramètres optiques tels que le coefficient d'absorption  $\alpha$ , et donné par relation suivante :

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad \text{I.12}$$

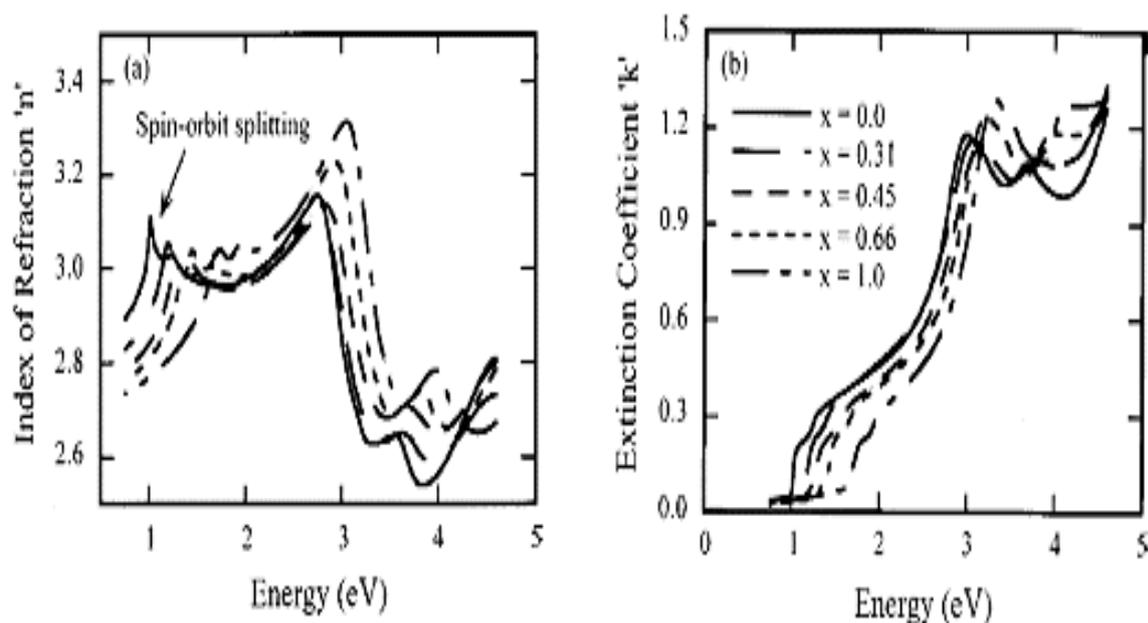


Figure I.10: Indice de réfraction complexe de  $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$  [36].

### I.3.5. Influence du Ga

L'introduction des atomes de Ga dans le  $\text{CuInSe}_2$  permet d'obtenir le composé  $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$  dont la valeur de la bande interdite est comprise entre 1.0 et 1.7 eV. Les cellules solaires à base du matériau en  $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$  avec un rapport  $\text{Ga}/(\text{In} + \text{Ga})$  de 25 à 35% (bande interdite de 1.1 à 1.2 eV) présentent les meilleurs rendements [3, 4]. Ces performances sont attribuées à la présence de la couche d'OVC, couche déficitaire en cuivre en surface du  $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$  qui participe aux performances photovoltaïques de ce matériau. De même que les lacunes ( $2V_{\text{Cu}+\text{Ga}}$ ) sont moins stables que celles impliquant l'indium, et donc participent moins à neutraliser les défauts d'un point de vue électronique dans le  $\text{CuGaSe}_2$ .

On observe une diminution de la densité de défauts pour une quantité optimale de Ga ( $\frac{\text{Ga}}{\text{Ga}+\text{In}} = 0.3$ ) pour un composé en  $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$  [37] (Figure I.11). La présence d'un nombre plus faible de défauts implique moins de pertes par recombinaison dans le volume du matériau.

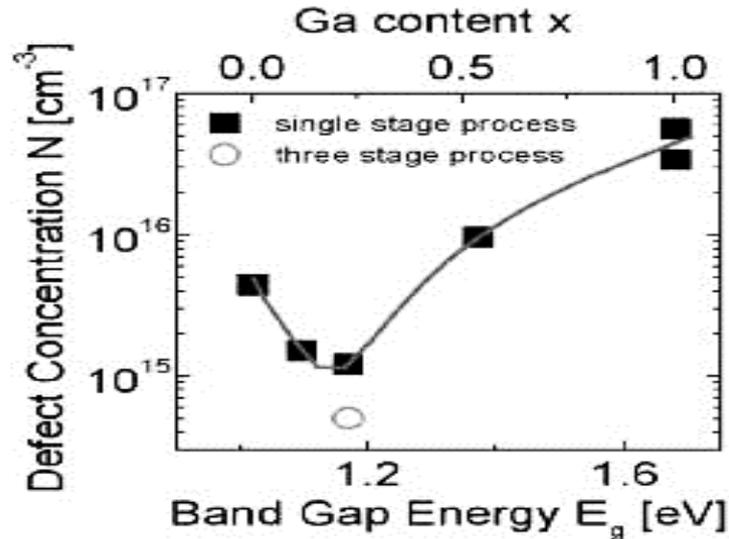


Figure I.11: Variation de la concentration des défauts en fonction de la bande interdite [37].

### I.3.6. Les techniques d'élaboration du matériau CIGS

Les techniques actuelles de préparation de CIGS se divisent en trois grandes catégories : la coévaporation, le procédé de sélénisation/sulfuration de précurseur métallique et les procédés de fabrication atmosphérique. Le contact arrière (c'est-à-dire la couche de molybdène) est déposé par pulvérisation cathodique. La sélénisation (l'électrodéposition ou la pulvérisation suivie d'une exposition à un gaz contenant du sélénium), la Co-évaporation ou la pulvérisation réactive sont ensuite utilisées pour déposer la couche absorbante. La strate tampon naturellement dopée n est adjointe via un bain chimique. Enfin, la couche fenêtre (conducteur supérieur transparent) est toujours déposée par pulvérisation. Dans cette partie nous allons présenter les techniques les plus intéressantes et qui donnent les rendements les plus élevés.

#### I.3.6.1. Co-évaporation

Le matériau absorbeur  $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$  avec un rapport  $\text{Ga}/(\text{In} + \text{Ga})$  de 20% à 30%, donnant des rendements photovoltaïques les plus élevés quand il est préparé par la technique de la co-évaporation à partir des sources élémentaires [28]. La co-évaporation est une méthode de dépôt où le cuivre, l'indium, le gallium et le sélénium sont évaporés indépendamment sous un vide poussé sur un substrat chauffé. La figure (I.12) montre une installation d'une co-évaporation comme celle utilisée pour la préparation des cellules solaires et de mini modules à l'échelle du laboratoire.

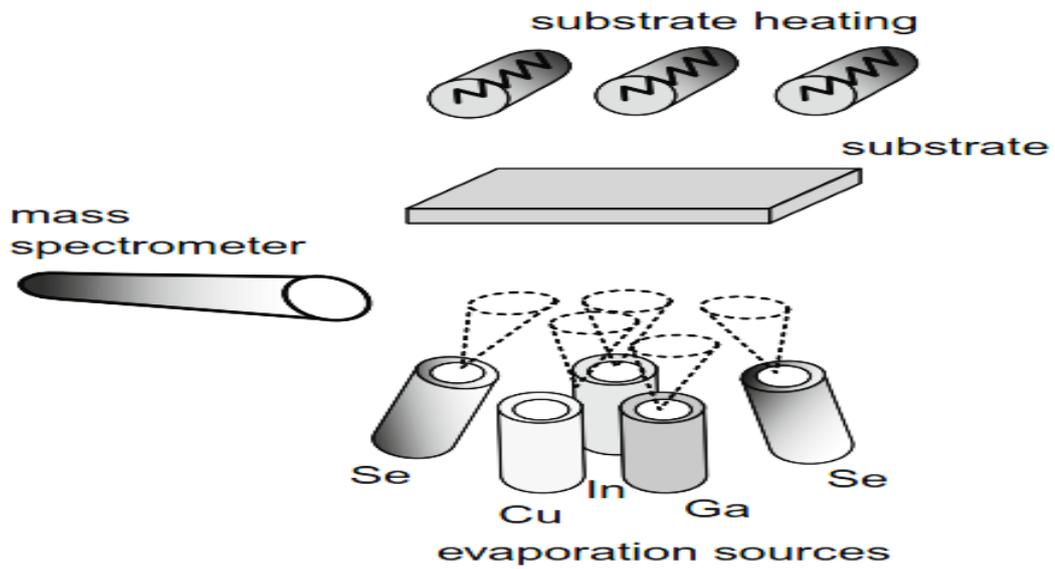


Figure I.12: Schéma d'un procédé de co-évaporation en ligne pour la synthèse de couches minces de CIGS à partir de sources élémentaires Cu, In, Ga et Se.

Le procédé de co-évaporation à partir de sources élémentaires, optimisé pour obtenir des cellules de haut rendement est constitué de trois étapes, appelées « three-stage process », développées par "National Renewable Energy Laboratory " (NREL). Cette procédure est présentée sur la figure (I.13).

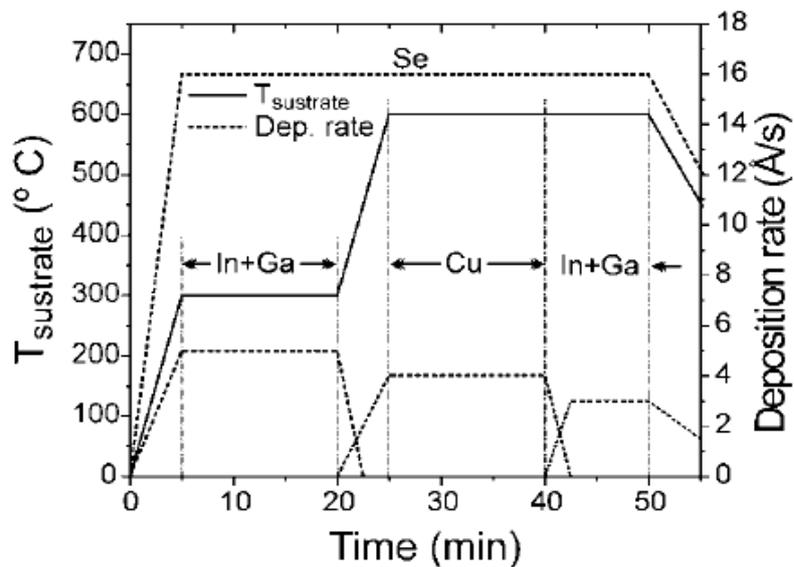


Figure I.13: Procédure du dépôt de CIGS en trois étapes par co-évaporation.

Une première étape débute par l'évaporation sur un substrat chauffé entre 300 et 350°C de In et Ga en présence d'un excès de Se, de façon à obtenir une phase de  $(\text{In,Ga})_2\text{Se}_3$ . Une deuxième étape consistant à augmenter la température du substrat entre 550 et 600°C de dépôt de Cu et Se permet d'obtenir une couche riche en cuivre et d'initier la croissance de gros grains, alors que le procédé se termine par un dépôt riche en indium et gallium pour assurer les bonnes propriétés électroniques de la couche.

Les dernières étapes sont effectuées avec une température de substrat de 550 à 600°C. La dernière étape permet de réajuster la composition globale par évaporation de In et Ga en présence d'un excès de Se jusqu'à l'obtention d'une couche légèrement déficitaire en Cu, et conduit à une surface moins rugueuse qu'après l'étape riche en Cu. L'excès de Se durant le procédé permet d'éviter l'évaporation de l'indium et du gallium, par l'intermédiaire de phases volatiles comme  $\text{In}_2\text{Se}$  et  $\text{Ga}_2\text{Se}$ , mais aussi la formation de lacunes de Se, pouvant détériorer la qualité de la cellule.

Les meilleures cellules obtenues par ce procédé atteignent un rendement de conversion de l'ordre de 19.9 % au NREL, avec un record à 20.3 % obtenu par le laboratoire ZSW [3]. Le record français est détenu par l'institut des matériaux Jean ROUXEL (IMN), avec un rendement de 17.8 %.

## **I.4. Propriétés du sulfure de cadmium CdS**

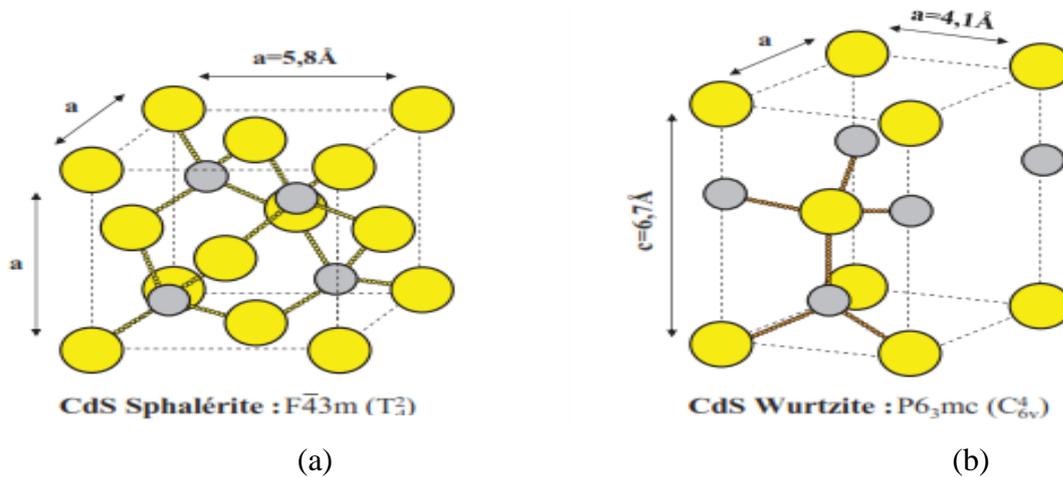
### **I.4.1. Choix du CdS**

Le CdS appartenant au groupe II-VI est un semi-conducteur important de type n, à température ambiante, une résistivité électrique assez élevée permettant de l'utiliser comme une couche tampon très mince dans les cellules solaires photovoltaïques poly-cristallines bien connues telles qu'en CdTe et CIGS et dans les cellules solaires photo électrochimiques (PEC). La structure de la cellule solaire basée sur le CdS montre une meilleure absorption de la lumière et des rendements élevés [38].

Les films formés par les semi-conducteurs II-VI à large gap optique sont d'intérêt technologique considérablement attrayant, car leurs émissions couvrent la région spectrale bleue et verte. En particulier, les films minces de CdS méritent l'attention parce que leur émission se trouve dans le domaine visible [39].

### I.4.2. Structure du CdS

Le sulfure de cadmium CdS est un semi-conducteur II-VI constitué par l'association des atomes de la colonne II (Cd) avec ceux de la colonne VI (S) de la table périodique des éléments chimiques. Le CdS est un semi-conducteur ayant deux types de structures : La structure cubique zinc blende de la sphalérite (figure. I.14.a) et la structure hexagonale wurtzite (figure. I.14.b).



**Figure I.14: Structures du CdS et paramètres de mailles des réseaux cubique (a) et hexagonal (b) pouvant être adoptés par le CdS[40].**

Toutes les deux, se caractérisent par une disposition tétraédrique des atomes. La structure du type blende est une structure cubique à faces centrées (CFC) dont la maille primitive contient 4 cations ( $\text{Cd}^{2+}$ ) et quatre anions ( $\text{S}^{2-}$ ). Chaque espèce d'un constituant est entourée à égale distance par quatre atomes de l'autre constituant. L'ensemble définit un tétraèdre régulier dont les atomes occupent les sommets. La structure du CdS a un paramètre de maille  $a = 5,8 \text{ \AA}$ , et pour la phase Wurtzite les paramètres des maille  $a = 4,1 \text{ \AA}$  et  $c = 6,7 \text{ \AA}$ .

### I.4.3. Propriétés optiques du CdS

Les propriétés optiques généralement rapportées sont : la transmission optique, avec quelques études également sur la photoluminescence. Tous les films CdS ont une transparence optique très élevée (en général entre 70 et 80%)[41], dans les régions visibles du spectre solaire, idéal pour les applications photovoltaïques. Le CdS en couche mince est un matériau à gap optique direct, sa valeur varie entre 2.33 et 2.56 eV [42], ou entre 2.1 à 2.4 eV [43] à différentes

températures. L'indice de réfraction de couche mince en CdS est 2.5 [44].

#### I.4.4. Propriétés physiques du CdS

Beaucoup d'attention a été portée au sulfure de cadmium en couche mince grâce principalement à leurs propriétés remarquables dans le domaine de la conversion photovoltaïque en tant que fenêtre optique pour l'absorbeur CdTe, et en tant que couche tampon pour CIS/CIGS du fait que son paramètre de réseau est voisin de celui du di-séléniure de cuivre indium CuInSe<sub>2</sub>. Le tableau (I.4) regroupe certaines propriétés physiques de CdS.

Propriétés	Structure de CdS	
	Zinc-blende	Wurtzite
Paramètres de maille (nm)	$a_0 = 0.582$	$a_0 = 0.4135, c_0 = 0.664$
Masse volumique (g. cm <sup>-3</sup> )	4.87	4.82
Energie du gap E <sub>g</sub> (eV)	2.50	2.50
Point de fusion (°C)		1750
Indice de réfraction		2.506, 2.529
Constante diélectrique statique $\epsilon(0)$	9.3	
Constante diélectrique optique $\epsilon(\infty)$	6.3	
Masse effective de l'électron $m_e^*$	0.19 $m_0$	
Masse effective du trou $m_h^*$	0.8 $m_0$	
Rayon de Bohr (nm)	3	

Tableau I.4: Quelques propriétés physiques du sulfure de cadmium [45].

#### I.4.5. Propriétés électriques

Le sulfure de cadmium est un semi-conducteur de type n [42]. La résistivité convenable pour un usage photovoltaïque (entre 1 et 100  $\Omega.cm$ ) pour des couches minces de CdS d'épaisseur variant entre 1 et 4 ( $\mu m$ ) ne peut être obtenue qu'après dopage ou un recuit thermique adéquat. Certes, les propriétés électriques des couches minces de CdS sont liées aux paramètres d'élaboration. Dans le cas des couches minces de CdS déposées selon le procédé CBD, la résistivité électrique est généralement très grande à cause de la très faible épaisseur des couches élaborées, elle peut atteindre des valeurs dépassant  $10^5(\Omega.cm)$  [45]. Le tableau (I.5) montre quelques paramètres du CdS.

Paramètre	Symbole	Valeur
Bande interdite	$E_g$	2.42 eV
Mobilité des électrons	$\mu_n$	250 cm <sup>2</sup> /V s
Mobilité des trous	$\mu_p$	15 cm <sup>2</sup> /V s
Permittivité relative	$\epsilon_r$	8.9
Durée de vie des porteurs	$\tau_p = \tau_n$	1 μs

Tableau I.5: Paramètres du sulfure de cadmium (CdS) à 300 K.

## I.5. Oxyde de zinc ZnO

L'oxyde de zinc (ZnO) est un matériau faisant partie de la famille des oxydes transparents conducteurs (TCO). La non-toxicité et l'abondance sur la terre de ce composant font de lui un candidat idéal comme film fenêtre ou contact électrique transparent pour les cellules solaires en couches minces.

### I.5.1. Propriétés structurales

L'oxyde de zinc ZnO est un semi-conducteur binaire de type II-VI non toxique en comparaison avec le CdS. La cristallisation de l'oxyde de zinc se fait selon le système hexagonal de structure wurtzite comme représentée dans la figure I.15.

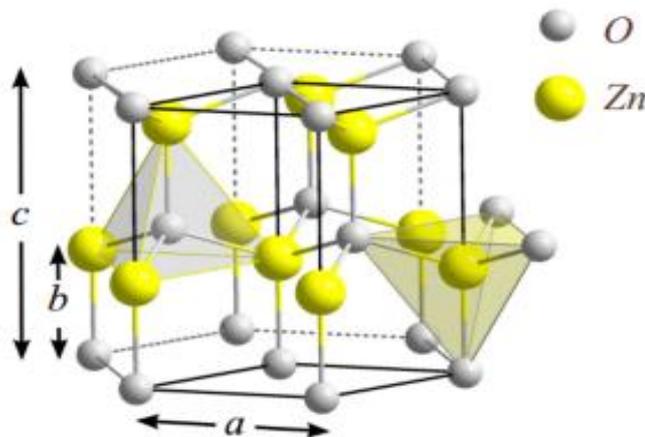


Figure I.15: La structure cristallographique du ZnO de type wurtzite avec les paramètres de maille :  $a = 3.250$  et  $c = 5.207$ .

Quatre atomes d'oxygène situés au sommet d'un tétraèdre et entourent chaque atome de zinc. Les valeurs des paramètres de la maille dans les conditions ordinaires de pression et température (300 K) sont  $a = 3.25 \text{ \AA}$  et  $c = 5.207 \text{ \AA}$ . Le rapport de  $c/a$  est également 1.602. Dans la direction parallèle au  $c$  - axe, la distance de Zn-O est 0.1992 nm, et c'est 0.1973 nm dans toutes trois autres directions de l'arrangement tétraédrique des plus proches voisins.

Dans le tableau (I.6) on présente un récapitulatif des caractéristiques importantes de l'oxyde de zinc [46].

Réseau	Hexagonal, wurtzite	
Paramètre de maille	$a = 3.25 \text{ \AA}$ } $c/a = 1.602$ $c = 5.207 \text{ \AA}$	
Distance entre $O^{2-}$ et $Zn^{2+}$ , les plus proche voisins	Suivant l'axe $c$	$d = 1.992 \text{ \AA}$
	Pour les trois autres	$d = 1.973 \text{ \AA}$
Rayon cristallin pour une coordination tétraédrique.	$Zn^{2+} = 0.74 \text{ \AA}$ $O^{2-} = 1.24 \text{ \AA}$	
Rayon ionique pour une coordination tétraédrique	Liaison covalente	$Zn \text{ neutre} = 1.31 \text{ \AA}$ $O \text{ neutre} = 0.66 \text{ \AA}$
	Liaison ionique	$Zn^{2+} = 0.60 \text{ \AA}$ $O^{2-} = 1.38 \text{ \AA}$

**Tableau I.6: Récapitulatif des caractéristiques de la structure cristalline de l'oxyde de zinc (ZnO).**

### I.5.2. Propriétés électriques

L'oxyde de zinc (ZnO) est un semi-conducteur de type II-VI à large bande interdite directe de 3.37 eV à température ambiante [47-48]. En pratique, on obtient uniquement par dopage une semi conductivité de type n. Les taux de dopage obtenus peuvent être très élevés (de l'ordre de  $10^{20}$  atomes/ $cm^3$ ), permettant d'atteindre des résistivités très faibles (de l'ordre de  $10^{-4} \Omega.cm$ ).

Une conductivité élevée ( $> 5 \times 10^3 \Omega^{-1}cm^{-1}$ ) est possible dans le ZnO de type n, en raison des défauts intrinsèques, des dopants (Al, In, Ga, B, F) ou en combinaison [46]. Les mobilités des électrons dans des couches minces de ZnO sont typiquement de l'ordre de 20 à 30  $cm^2/V.s$ . En outre, la mobilité maximale obtenue dans les cristaux simples de ZnO est de l'ordre de  $\sim 200 cm^2/V.s$ [48]. La réaction de formation (stœchiométrie) est la suivante :



Nous notons que ce matériau peut être comme semi-conducteur dont les porteurs majoritaires sont des trous (type p). La conductivité de type p a été obtenue pour la première fois en 2001. Le tableau (I.7) résume quelques propriétés électriques de ZnO.

<b>Nature de la bande interdite</b>	<b>Directe</b>
Largeur de la bande interdite à 300 K	$3.4 \pm 0.02$ eV
Masse effective des électrons	$0.28 m_0$
Masse effective des trous	$0.6 m_0$
Type de conductivité	n et (p)
Mobilité maximale des électrons	$200 cm^2/V.s$
Densité d'états dans BC	$3.71 \cdot 10^{18} cm^{-3}$
Densité d'états dans BV	$1.16 \cdot 10^{19} cm^{-3}$
Résistivité maximale	$10^6 \Omega . cm$
Résistivité minimale	$10^{-1} \Omega . cm$

**Tableau I.7: Quelques propriétés électriques de ZnO.**

### **I.5.3. Propriétés optiques**

Le ZnO est un matériau transparent dans le domaine visible. Il présente un intérêt considérable qui réside dans ses propriétés remarquables telles que la largeur de sa bande interdite qui permet d'émettre du visible à l'ultraviolet. Ceci lui permet d'être classé parmi les oxydes transparents conducteurs TCO ("transparent conductive oxide") lorsqu'il est dopé [47]. D'un autre côté, son gap direct induit des recombinaisons radiatives très efficaces [49]. Pour un semi-conducteur à gap direct tel que ZnO, le coefficient d'absorption  $\alpha$  ( $cm^{-1}$ ) pour une énergie des photons est défini par l'équation de Tauc[50]:

$$(\alpha \cdot hv) = B(hv - E_g)^{1/2} \quad \text{I. 14}$$

Où  $hv$  est l'énergie des photons incidents,  $E_g$  le gap optique et B une constante.

Le coefficient d'absorption  $\alpha$  peut être calculé à partir du coefficient de transmission T (%), du coefficient de réflexion R (%) et de l'épaisseur  $d$  de la couche mince[50]:

$$T = (1 - R)^2 \exp(-\alpha d) \quad \text{I. 15}$$

Dans la figure (I.16) est représentée la transmittance optique, réflexion, et absorption mesurées en fonction de la longueur d'onde pour ZnO.

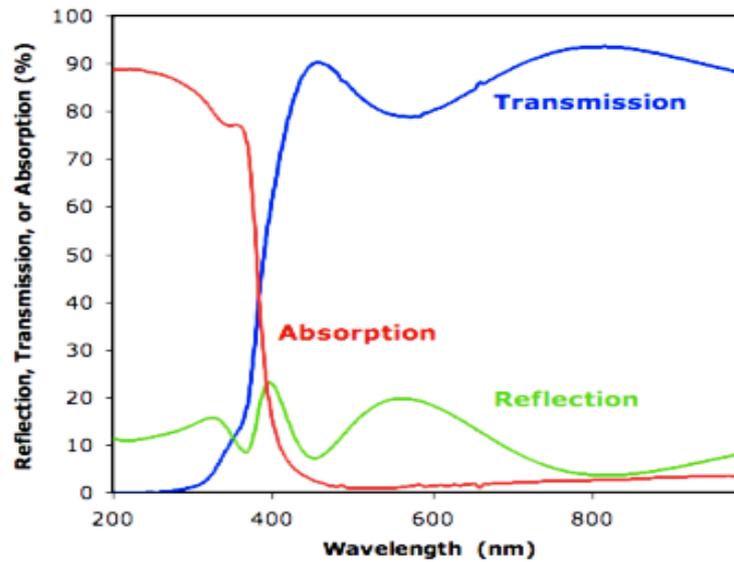


Figure I.16: Transmission, réflexion, et absorption mesurées en fonction de la longueur d'onde pour ZnO [51].

Dans le tableau (I.8) sont groupées quelques propriétés optiques de ZnO.

Coefficient d'absorption $\alpha$ ( $cm^{-1}$ )	$10^4$
Indice de réfraction à 560 nm	1.8 – 1.9
Indice de réfraction à 590 nm	2.013 – 2.029
Constante diélectrique $\epsilon$	8.7
Transmittance T (visible) 350 (°C)	80 %

Tableau I.8: Quelques propriétés optiques de ZnO[52].

## **I.6. Conclusion**

Plusieurs études ont montré que les semi-conducteurs chalcopyrites  $\text{CuInSe}_2$  et  $\text{Cu(In,Ga)Se}_2$  sont des matériaux en couches minces et convenables à être incorporer dans les dispositifs photovoltaïques à rendements élevés. Les cellules solaires à base de CIGS ont montré une stabilité à long terme et des efficacités de conversion plus élevés que toutes les cellules solaires en couches minces, en dépassant les 20%.

Dans ce chapitre, nous avons présenté les matériaux CIGS, CdS et ZnO qui constituent la cellule solaire à base de CIGS. Nous avons aussi donné un aperçu général sur les différentes caractéristiques et propriétés physiques de ces matériaux, à savoir les propriétés structurales, optiques et électriques. Ceci est dans le but pour mieux comprendre leurs comportements et les maîtriser afin de les introduire dans les cellules photovoltaïques et améliorer leurs rendements de conversion photo-électriques.

**Chapitre II: Généralités sur les cellules solaires simple à  
base de CIGS**

## II.1. Introduction

L'énergie solaire photovoltaïque est une énergie électrique produite à partir du rayonnement solaire grâce à des panneaux dont la cellule solaire est le composant électronique de base. Parmi les matériaux convenables pour le photovoltaïques, on trouve le semi-conducteur. Les photons incidents du rayonnement solaire sont absorbés par le semiconducteur et créent des paires électron-trou qui participent dans la génération d'un courant électrique.

Actuellement, la technologie couches minces groupe trois types de cellules solaires. Ce sont des cellules solaires au tellure de cadmium (CdTe), des cellules solaires en silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) et des cellules solaires en cuivre indium-gallium-diséléniure (CIGS). Les autres technologies de couches minces telles que les cellules solaires à pérovskite, les cellules solaires à colorant (DSSC), les cellules solaires organiques et les cellules solaires à points quantiques (QDSC) restent au stade de la recherche en laboratoire. Les cellules solaires a-Si:H souffrent de leur rendement et de leur instabilité relativement faible tandis que les cellules solaires CdTe et CIGS présentent des rendements intéressants et montrent une tendance de développement rapide dans ces dernières années.

Dans ce chapitre, nous présentons les caractéristiques du rayonnement solaire, la description de la conversion photovoltaïque tout en étudiant les phénomènes physiques ayant lieu tels la génération des photoporteurs et leur recombinaison dans un semi-conducteur. Nous décrivons aussi le principe de fonctionnement et les caractéristiques courant -tension des cellules solaires ainsi que leurs paramètres photovoltaïques. Une étude sera aussi incluse dans ce chapitre qui explique les cellules solaires en CIGS.

## II.2. Rayonnement solaire

La distance de la terre au soleil est d'environ 150 millions de kilomètres et la vitesse de la lumière est d'un peu plus de  $3 \times 10^8$  (m/s), les rayons du soleil mettent donc environ 8 min à nous parvenir [53]. Le rayonnement reçu par la terre en incidence normale est voisine  $1400 \text{ W/m}^2$  avant d'aborder la couche atmosphérique [53].

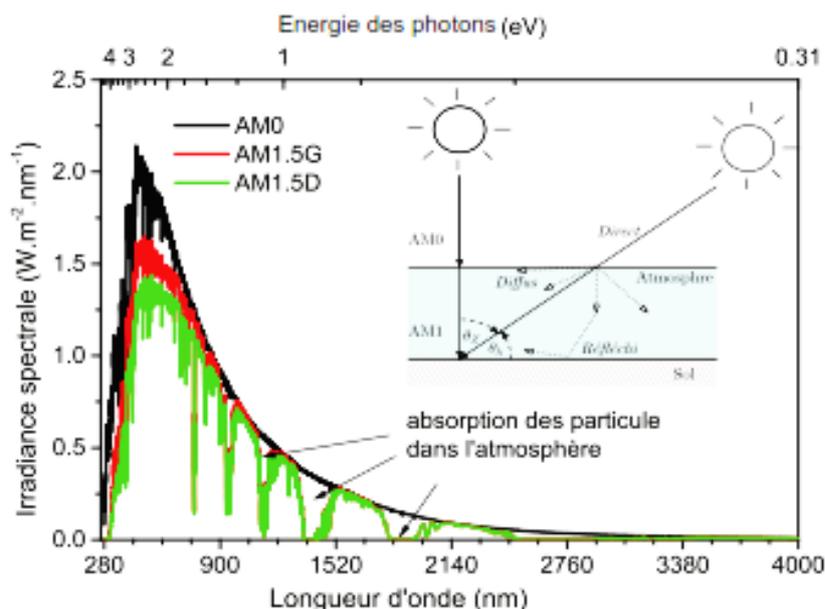
Pour tenir compte de l'épaisseur d'atmosphère traversée par le rayonnement solaire incident (Figure II.1), on introduit un coefficient appelé nombre de masse (AM) défini par :

$$AM = \frac{1}{\cos(\theta_z)} = \frac{1}{\sin(\theta_h)} \quad \text{II. 1}$$

Où  $\theta_z$  et  $\theta_h$  sont les angles d'incidence par rapport au zénith et par rapport à l'horizon, respectivement. La Figure (II.1) montre le spectre AM1.5 qui correspond à un angle  $\theta_z = 48.2^\circ$ ,

il a été choisi comme le spectre solaire standard pour les tests des cellules solaires et la mesure des rendements est basé sur ce spectre. Les lettres G et D désignent le faisceau lumineux global et le faisceau lumineux direct, respectivement. Le faisceau global prend en compte les faisceaux lumineux réfléchis par le sol ou diffusés par les nuages ou autres particules dans l'air, alors que le faisceau direct est celui qui arrive directement au travers l'atmosphère. AM1.5D est utilisé pour les tests des cellules solaires sous concentration. AM0 signifie que la masse d'air est nulle, c'est-à-dire le spectre solaire en dehors de l'atmosphère.

Les conditions standard de caractérisation sont définies par les normes IEC-60904 de l'International Electrotechnical Commission (IEC) selon une distribution spectrale AM1.5G global (somme des rayonnements directs et diffus), d'intensité  $100 \text{ mW/cm}^2$  et pour une température de cellule de  $25^\circ\text{C}$  [53]. Au sol, le rayonnement solaire a au moins deux composantes : une composante directe et une composante diffusée (rayonnement incident diffusé ou réfléchi par un obstacle : nuages, sol) formant le rayonnement global. La figure (II.1) montre l'intensité de la lumière émise par le soleil en fonction de la longueur d'onde, que l'on appelle l'irradiance du spectre solaire.



**Figure II.1: Les spectres solaires AM0, AM1.5G (Global) et AM1.5D (Direct), obtenus par le standard ASTM G173-031[54].**

Le spectre solaire est la répartition de l'intensité de la lumière du soleil en fonction de la longueur d'onde. La lumière solaire est en effet composée de toutes sortes de rayonnements de couleurs différentes, caractérisées par leur gamme de longueur d'onde. Les photons, grains de lumière qui composent ce rayonnement électromagnétique sont porteurs d'une énergie qui est

reliée à leur longueur d'onde par la relation :

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{1.24}{\lambda} \quad \text{II. 2}$$

où  $\nu$  : fréquence de la radiation,  $\lambda$  : longueur d'onde de la radiation en  $\mu\text{m}$ ,  $c$  : vitesse de la lumière,  $E$  : énergie du photon en eV, et  $h$  : constante de Planck.

La figure (II.2) représente le spectre solaire et la réponse spectrale des matériaux en CIGS.

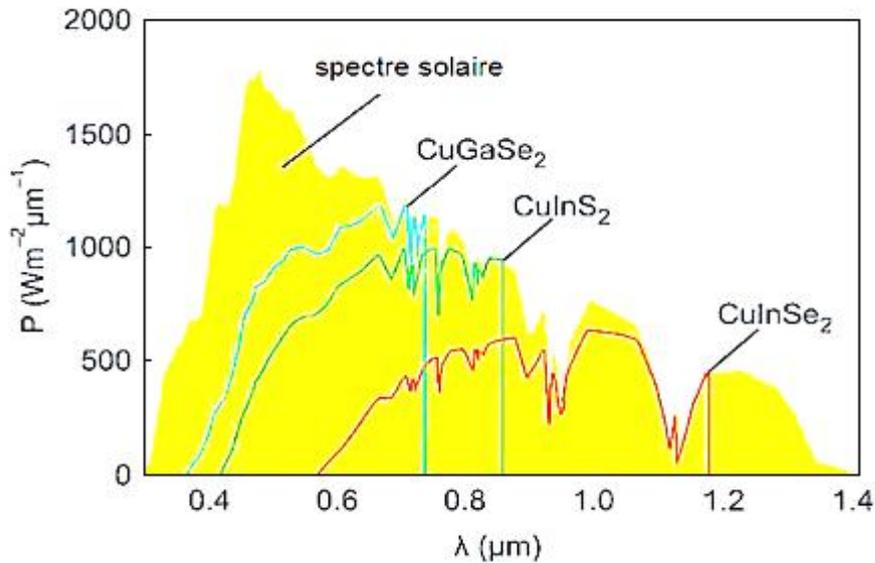


Figure II.2: Spectre solaire et la réponse des matériaux en CIGS[55].

### II.3. Génération de porteurs en excès par la lumière

Une radiation lumineuse absorbée par un semi-conducteur est décrite suivant la loi de Lambert-Bouguer [56]:

$$I(x) = I(1 - R) \exp(-\alpha x) = I_0 \exp(-\alpha x) \quad \text{II. 3}$$

où  $I$  : le flux de photons ( $\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ ),  $x$  : profondeur d'absorption du faisceau dans le matériau à partir de la surface du semi-conducteur,  $R$  : coefficient de réflexion représente la part de l'énergie lumineuse incidente  $I$  et réfléchi à la surface du matériau,  $\alpha$  : coefficient d'absorption traduit la probabilité d'absorption d'un photon par unité de longueur.

Quand les photons incidents ont une énergie suffisante pour provoquer le transfert des électrons de la bande de valence vers la bande de conduction, des paires électron-trou peuvent se créer. Ce phénomène appelé mode d'absorption intrinsèque ou fondamentale prédomine dans les cellules solaires [56].

Le calcul du taux de génération de paires électron-trou,  $G(x)$  ( $cm^{-3}s^{-1}$ ) s'effectue de la façon suivante. Appelant  $I_0$ , le flux de photons ( $cm^{-2}s^{-1}$ ) incidents sur la face éclairée du matériau et  $\alpha$  ( $cm^{-1}$ ) le coefficient d'absorption de la lumière par le matériau. A la profondeur  $x$ , ce taux de génération vaut [56] :

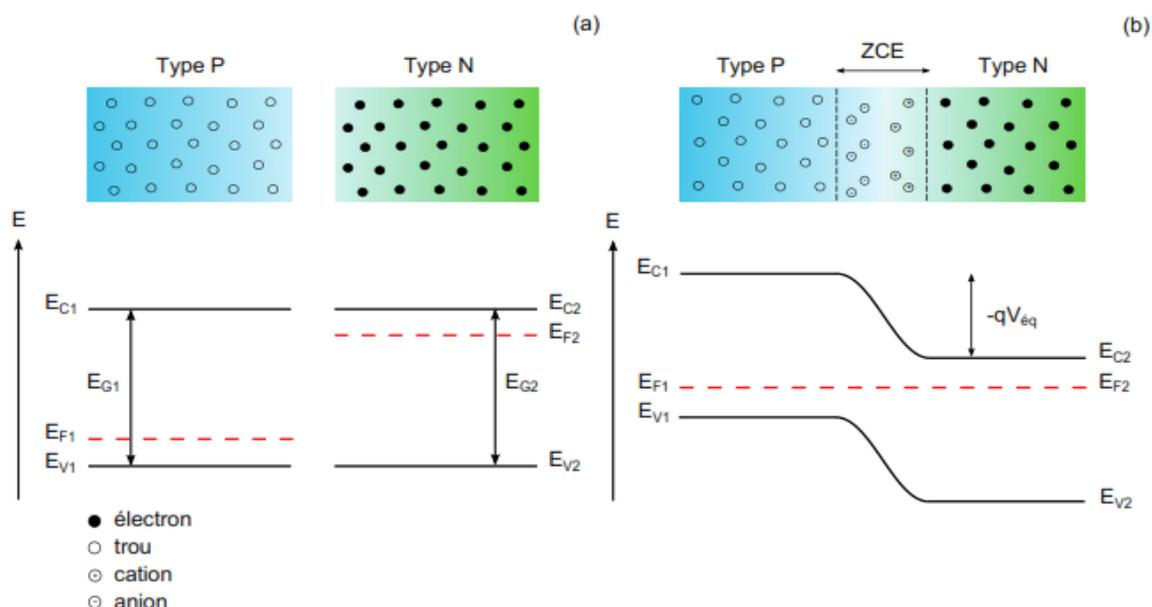
$$G(x) = \alpha \cdot (1 - R) I_0 \cdot \exp(-\alpha x) \quad \text{II. 4}$$

## II.4. Fonctionnement d'une cellule solaire

### II.4.1. La jonction P-N

L'association de deux semi-conducteurs, l'un de type p et l'autre de type n, conduit à la formation d'une jonction p-n. Un schéma représentant les diagrammes énergétiques des deux semi-conducteurs avant et après leur mise en contact est représenté sur la Figure (II.3).

Lorsque les deux semi-conducteurs sont constitués du même matériau mais diffèrent par le type de dopage, comme c'est le cas pour le silicium cristallin, on parle d'homojonction. Dans le cas contraire où les matériaux semi-conducteurs sont différents, comme pour les couches minces (comme les cellules à base de CIGS), on parle d'hétérojonction.



**Figure II.3: Diagramme énergétique des semi-conducteurs de type P et N avant (a), et après (b) mise en contact, présentant la position des bandes de valence (BV), des bandes de conduction (BC), des niveaux de Fermi ( $E_F$ ) et des largeurs de bande interdite ( $E_g$ ). La différence de potentiel entre les deux semi-conducteurs ( $V_{eq}$ ) est proportionnelle à l'écart entre leur bande de conduction ( $E_{C1}-E_{C2}$ ).**

La mise en contact des deux éléments de la jonction entraîne une modification de la structure de bande. Cette mise en contact va entraîner une migration des porteurs majoritaires de chaque semi-conducteur de part et d'autre de la jonction afin d'équilibrer les niveaux de Fermi. Cette migration va conduire à un appauvrissement en porteur de la zone située à proximité de l'interface des deux semi-conducteurs, laissant ainsi des charges fixes sur des ions, chargés négativement dans la partie P et positivement dans la partie N.

Dans cette zone de déplétion, appelée zone de charge d'espace (ZCE), le semi-conducteur de type P devient chargé négativement, et le semi-conducteur de type N devient chargé positivement. Une différence de potentiel ( $V_{eq}$ ) s'établit alors à l'interface des deux semi-conducteurs, créant ainsi un champ électrique orienté de P vers N. En dehors de la ZCE, les semi-conducteurs restent neutres.

Lorsque la jonction P-N est polarisée, il devient possible de contrôler l'énergie entre les niveaux de Fermi. Une polarisation en direct permet de diminuer la barrière de potentiel entre les deux semi-conducteurs jusqu'à une valeur à laquelle les électrons dans la bande de conduction transitent du semi-conducteur de type N vers le semi-conducteur de type P (Figure II.4. a). Au contraire, une polarisation en inverse, augmente cette barrière de potentiel et inhibe le passage des électrons (Figure II.4.b).

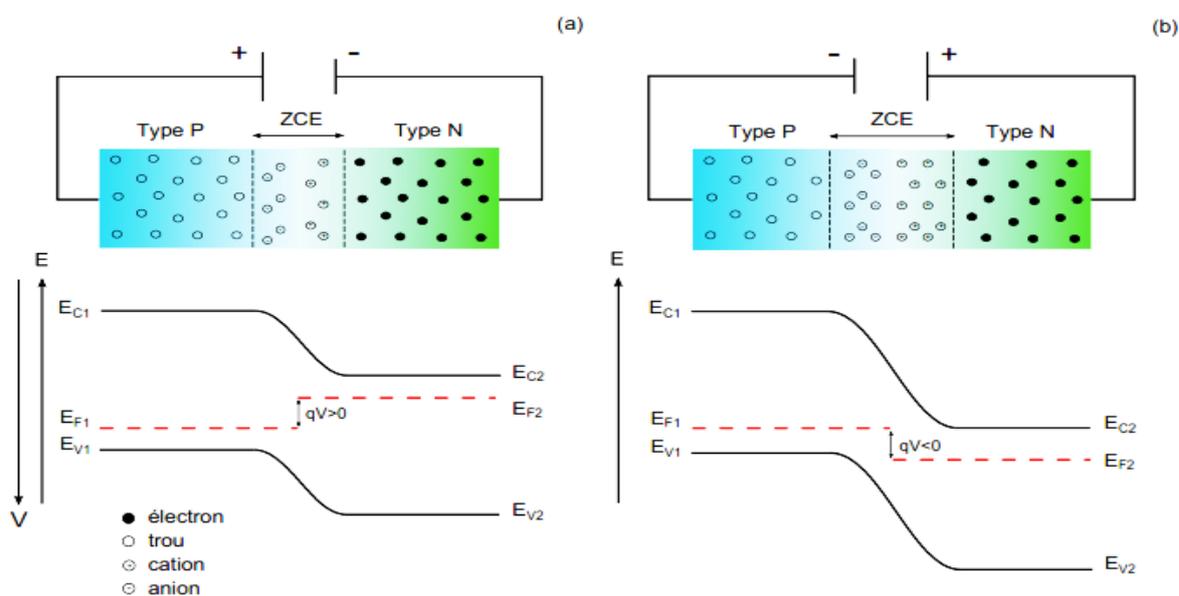


Figure II.4: Diagramme énergétique d'une jonction P-N lors d'une polarisation directe (a) et inverse (b).

Lorsqu'un semi-conducteur est illuminé, il va absorber les photons d'énergie supérieure à son gap. Cette absorption conduit à l'excitation d'un électron, qui passe alors de la bande de valence vers la bande de conduction. Dans un semi-conducteur isolé, l'électron va finir par se désexciter et par se recombiner avec le trou de la bande de valence. Dans une jonction P-N, la présence du champ électrique et du gradient de porteur va permettre à une partie des électrons photo-générés de diffuser vers le semi-conducteur de type N avant leur recombinaison. Il y a alors apparition d'un photocourant (J) de porteur minoritaire, de signe opposé à celui du courant de diffusion des porteurs majoritaires, lorsque la diode est à l'obscurité. Cette situation est représentée sur la Figure (II.5), en situation de circuit ouvert.

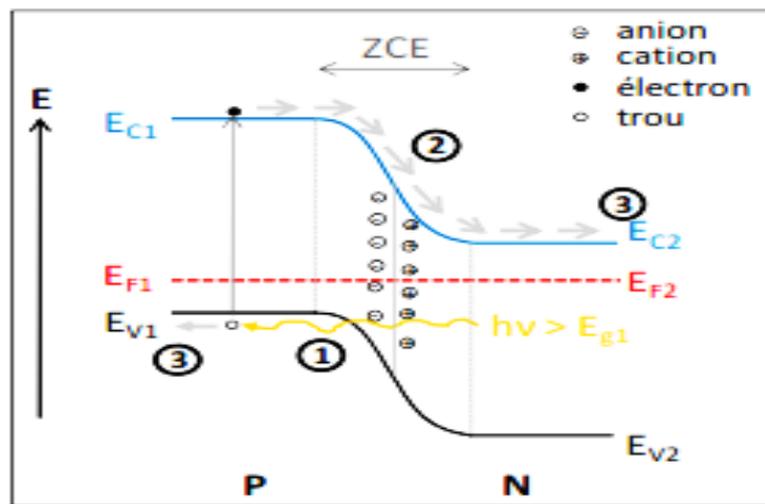


Figure II.5: Diagramme énergétique d'une jonction P-N sous éclairage, en situation de circuit-ouvert. 1) Création d'une paire électron-trou ; 2) Séparation des charges par la jonction P-N ; 3) Collecte des porteurs.

## II.5. Caractéristiques Electriques d'une cellule solaire

### II.5.1. Caractéristiques (I-V) sous obscurité

A l'obscurité, la caractéristique courant-tension  $J(V)$  d'une jonction P-N est donc celle d'une diode idéale et l'équation qui régit son fonctionnement est l'équation (II.5) :

$$J = J_0 \left( \exp\left(\frac{qV}{nKT}\right) - 1 \right) \quad \text{II.5}$$

Ou par le courant :  $I = I_0 \left( \exp\left(\frac{qV}{nKT}\right) - 1 \right)$

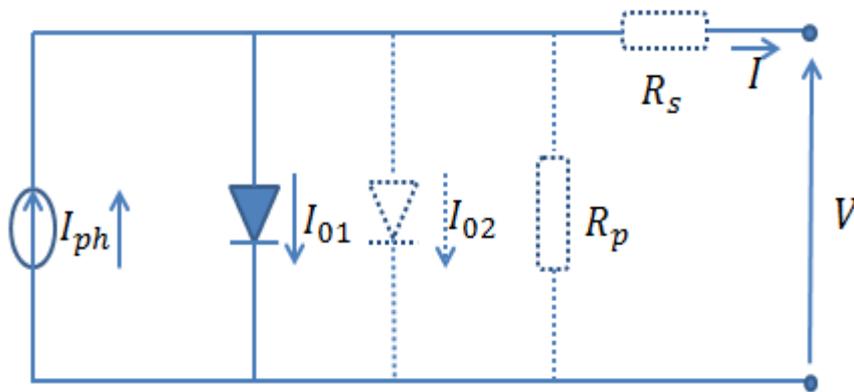
où  $J_0$  est la densité de courant de saturation,  $n$  est le facteur d'idéalité de la diode,  $K$  est la constante de Boltzmann,  $T$  est la température en degrés Kelvin et  $q$  la charge de l'électron [34].

## II.5.2. Caractéristiques (I-V) sous illumination

### II.5.2.1. La cellule solaire idéale

Une pile solaire idéale peut être représentée par une source de courant reliée en parallèle avec une diode de rectification, suivant les indications du circuit équivalent de la figure (II.6).

La caractéristique ( I-V) correspondante est décrite par l'équation (II.6) de Shockley de pile solaire [57].



**Figure II.6: Le circuit équivalent d'une pile solaire idéale (lignes continues). Des composants Non-idéaux sont montrés par les lignes en pointillée.**

$$I = I_{ph} - I_0 \left( \exp\left(\frac{qV}{K_B T}\right) - 1 \right) \quad \text{II.6}$$

Où :  $K_B$  est la constante de Boltzmann,

$T$  est la température absolue,

$q (> 0)$  est la charge d'électron,

$V$  est la tension sur les bornes de la cellule.

$I_0$  est le courant de saturation de diode

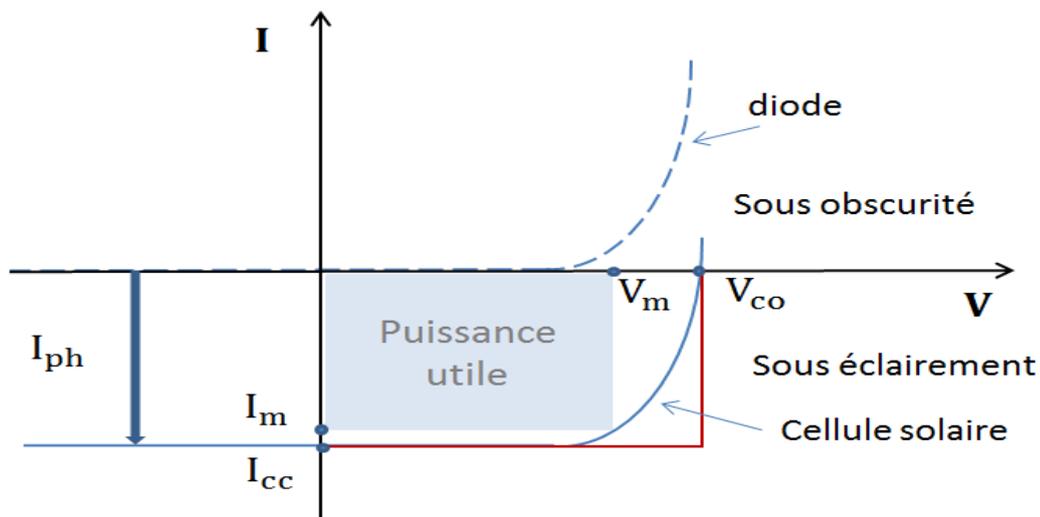
$I_{ph}$  est le courant photogénéré

$I_0$  est le courant de saturation de diode servant de rappel qu'une pile solaire dans l'obscurité est simplement un semi-conducteur redresseur courant, ou diode.

Le courant photogénéré  $I_{ph}$  est étroitement lié au flux de photon incident sur la cellule et sa

dépendance à la longueur d'onde de la lumière est fréquemment discutée en termes de rendement quantique ou de réponse spectrale. Le courant photogénéré est habituellement indépendant de la tension appliquée à des exceptions possibles dans le cas d'a-Si :H et de quelques autres matériaux de couches minces.

La caractéristique d'une cellule à l'obscurité est identique à celle d'une diode. Nous avons représenté sur la figure (II.7) les deux caractéristiques courant-tension d'une cellule solaire à l'obscurité en pointillés, et sous illumination en trait plein. On remarque que la courbe sous illumination est simplement décalée par rapport à la première d'une valeur  $I_{cc}$ , qui traduit la génération constante du courant par la lumière. Cette valeur est appelée courant de court-circuit, puisque c'est le courant que génère la cellule sous lumière à tension nulle. La valeur  $V_{co}$ , à l'inverse, est la tension de circuit ouvert. Il représente en fait l'égalité du courant de génération par la lumière et du courant à l'obscurité.



**Figure II.7: Caractéristiques I(V) à l'obscurité et sous éclairage d'une cellule photovoltaïque[57].**

La figure (II.7) montre la caractéristique (J-V). Dans le cas idéal, le courant de court-circuit  $I_{cc}$  est égal au courant photogénéré  $I_{ph}$ , et la tension de circuit ouvert  $V_{co}$  est donné par :

$$V_{oc} = \frac{K_B T}{q} \ln \left( 1 + \frac{I_{ph}}{I_0} \right) \quad \text{II. 7}$$

La puissance  $P = I.V$  produite par la cellule est maximum quand le produit  $(V.I)$  est maximum. Si  $V_m$   $I_m$  sont la tension et le courant pour lesquels on a ce maximum, la puissance

maximum est la surface du plus grand rectangle de côtés  $V_m$  et  $I_m$  qu'on peut inscrire sous la courbe I (V) (figure II.7). Le facteur de forme est défini par la relation suivante:

$$FF = \frac{P_{max}}{V_{co} \cdot I_{cc}} = \frac{V_m \cdot I_m}{V_{co} \cdot I_{cc}} \quad \text{II. 8}$$

Le facteur de forme  $FF$  d'une pile solaire avec la caractéristique idéale sera fourni par l'indice inférieur 0. Il ne peut pas être déterminé analytiquement mais il peut être montré que  $FF_0$  dépend seulement du rapport  $v_{co} = V_{co}/K_B T \cdot FF_0$  est déterminé, à une excellente exactitude, par l'expression approximative (II .9)[57].

$$FF = \frac{v_{co} - \ln(v_{co} + 0.72)}{v_{co} + 1} \quad \text{II. 9}$$

Le rendement d'une cellule solaire dépend de la fraction du rayonnement absorbée par le matériau semi-conducteur et il est donné par le rapport de la puissance maximale fournie à celle du rayonnement incident.

$$\eta_{max} = \frac{P_{max}}{P_{in}} = FF \cdot \frac{V_{co} \cdot I_{cc}}{P_{in}} \quad \text{II. 10}$$

Où  $P_{in}$  est la puissance incidente de la lumière est égale à la puissance solaire  $P_{solaire}$  ( $P_{solaire} = 100 \text{ mW/cm}^2$ ). Ce rendement peut être amélioré en augmentant le facteur de forme, le courant de court-circuit et la tension en circuit ouvert.

### **II.5.2.2. La cellule solaire réelle**

La caractéristique (I-V) d'une pile solaire réelle diffère habituellement dans une certaine mesure de la caractéristique idéale (II.6). Un modèle de deux-diode est souvent utilisé et des résistances série ( $R_s$ ) et parallèles (ou shunt,  $R_p$ ), menant à une caractéristique de la forme [57]:

$$I = I_{ph} - I_{01} \left\{ \exp \left( \frac{V+IR_s}{K_B T} \right) - 1 \right\} - I_{02} \left\{ \exp \left( \frac{V+IR_s}{2K_B T} \right) - 1 \right\} - \frac{V+IR_s}{R_p} \quad \text{II. 11}$$

Où le courant de lumière produit  $I_{ph}$  peut, parfois, dépendre de la tension. Son schéma équivalent est montré dans le circuit équivalent de la figure (II.6) par les lignes pointillées. L'effet de la deuxième diode, et des résistances série et parallèle, sur la caractéristique (I-V) de la pile solaire est montré sur les figures (II.8) respectivement (a) et (b).

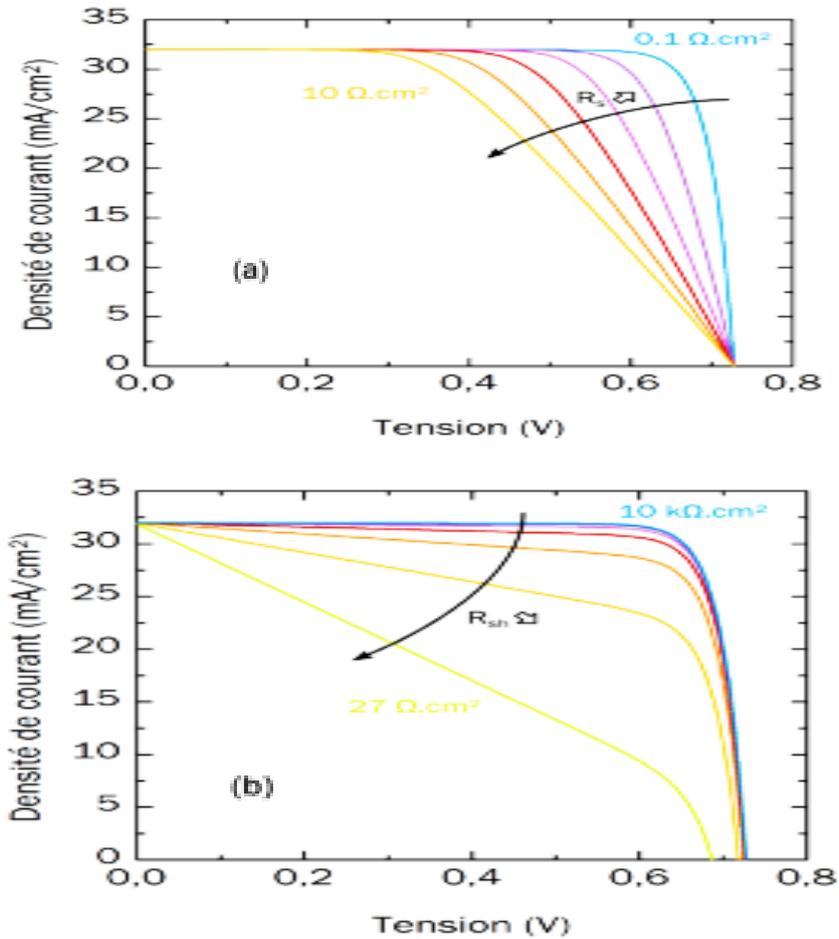


Figure II.8: (a) Effet de la résistance série, (b) Effet de la résistance parallèle.

Le facteur de forme dépend de différents mécanismes de pertes dans la cellule. En plus des recombinaisons, les pertes sont aussi dues aux phénomènes de résistances parasites.

L'effet de la résistance série sur le facteur de forme peut être compte tenu par l'écriture suivante :

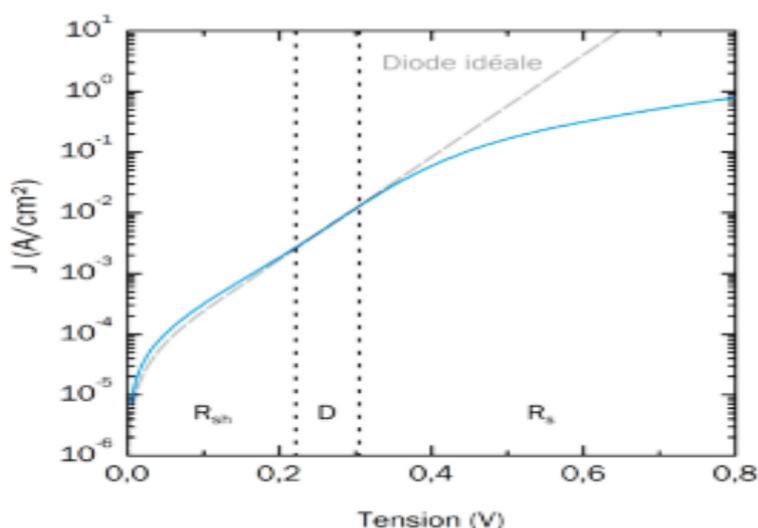
$$FF = FF_0(1 - r_s) \quad \text{II.12}$$

Où  $r_s = R_s I_{cc} / V_{co}$ . Une expression analogue existe également pour la résistance parallèle[57]. Premièrement, les différentes interfaces et couches du dispositif (notamment le contact arrière et la couche fenêtre) possèdent une résistance. La somme de ces contributions se manifeste électriquement par une résistance en série  $R_s$ . La résistance série influe essentiellement sur la pente de la courbe  $J(V)$  autour du  $V_{co}$ . La figure (II.8a) montre des courbes  $J(V)$  sous éclaircissement (théoriques) pour différentes valeurs de  $R_s$ . Dans le cas des cellules CIGS de bonne qualité,  $R_s$  vaut généralement quelques dixièmes d' $\Omega.cm^2$ . Une augmentation de l'ordre de  $1\Omega.cm^2$  de cette résistance peut avoir des effets significatifs sur le facteur de forme.

Les court-circuits constituent le second effet parasite pris en compte dans ce modèle. Ils peuvent provenir de défauts de recouvrement du contact arrière par le CIGS (court-circuit CdS-

Mo) et plus généralement de problèmes d'adhésion de certaines couches. Ils sont modélisés par une conductance en parallèle avec la diode. Communément, c'est l'inverse de cette dernière qui est utilisé dans l'analyse des dispositifs photovoltaïques, c'est-à-dire la résistance parallèle  $R_{sh}$  (Shunt Resistance). A l'inverse de la résistance en série, celle-ci doit donc être la plus élevée possible. La figure (II.8b) montre des courbes  $J(V)$  théoriques d'une cellule solaire avec différentes valeurs de résistance parallèle. Lorsque  $R_{sh}$  est de l'ordre du  $k\Omega.cm^2$  et plus, son effet sur le facteur de forme est limité. Cependant, à des ordres de grandeurs inférieurs au  $k\Omega.cm^2$ , l'effet des court-circuits peut fortement influencer les performances de la cellule.

Les mesures  $I(V)$  sous obscurité permettent d'extraire les paramètres de la diode (le courant de saturation  $J_0$  et le facteur d'idéalité  $n$ ), ainsi que les valeurs des résistances  $R_s$  et  $R_{sh}$ . La figure (II.9) présente une courbe  $J(V)$  mesurée sous obscurité sur une cellule CIGS.



**Figure II.9 : Courbe  $J(V)$  sous obscurité d'une cellule en CIGS en échelle semi-log. La courbe en pointillés gris représente le même dispositif sans les résistances parasites (loi de Shockley). Les pointillés noirs verticaux délimitent les domaines dominés par les différents composants : résistance parallèle ( $R_{sh}$ ), diode (D) et résistance série ( $R_s$ )[58].**

### II.5.3. Rendement quantique et réponse spectrale

Le rendement quantique d'une pile solaire est défini comme le rapport du nombre d'électrons dans le circuit externe produit par un photon incident d'une longueur d'onde donnée. Ainsi, on peut définir l'efficacité quantique externe et interne (noté par  $EQE(\lambda)$  et  $IQE(\lambda)$ , respectivement). Ils diffèrent dans le traitement des photons réfléchis de la cellule : tous les photons empétant sur la surface de cellules sont pris en considération en valeur de l'EQE mais

seulement les photons qui ne sont pas réfléchis sont considérés en valeur d'*IQE*. Si le rendement quantique interne est connu, le courant photogénéré total est donné par[57] :

$$I_{ph} = q \int_{(\lambda)} \phi(\lambda) \{1 - R(\lambda)\} IQE(\lambda) d\lambda \quad \text{II. 13}$$

où :  $\phi(\lambda)$  est le flux de photon incident sur la cellule à la longueur d'onde  $\lambda$ ,

$R(\lambda)$  est le coefficient de réflexion de la surface supérieure,

$\lambda$  est la longueur d'onde de la lumière absorbée par la pile solaire.

Les valeurs du rendement quantique interne et externe sont par habitude mesurées pour évaluer la performance d'une pile solaire en employant des filtres ou des monochromateurs d'interférence.

La réponse spectrale (notée par  $SR(\lambda)$ , avec l'unité  $(A/W)$  est défini comme le rapport du photocourant produit par une pile solaire sous illumination monochromatique d'une longueur d'onde donnée, à la valeur de l'irradiation spectrale à la même longueur d'onde. Depuis le nombre de photons et d'irradiation sont reliés, la réponse spectrale peut être écrite en termes de rendement quantique comme [57]:

$$SR(\lambda) = \frac{\lambda q}{hc} QE(\lambda) = 0.808 \times \lambda \times QE(\lambda) \quad \text{II. 14}$$

La réponse spectrale dans l'équation (II.15) peut être interne ou externe, selon quelle valeur est utilisée pour le rendement quantique.

## II.6. Différents types de cellules

Dans la filière du photovoltaïque, il existe deux grands groupes de cellules solaires : la filière silicium et la filière couches minces.

### II.6.1. Filière silicium

Elle est composée par les cellules en silicium cristallin ou multicristallin. Les cellules photovoltaïques ont une structure à homojonction et à hétérojonction. Cette filière représente 90% du marché de la production des modules photovoltaïques. Les substrats de silicium cristallin utilisés sont encore assez épais (250  $\mu\text{m}$ ) et représentent une bonne partie du coût de fabrication d'où la tendance vers l'utilisation de substrats moins épais pour baisser les coûts de fabrication. 25% constitue le meilleur rendement obtenu en laboratoire par le professeur Martin Green de l'UNSW (University of New South Wales) [59].

## **II.6.2. Filière couches minces**

Bien que le rendement de la cellule en silicium soit important, la principale exigence de l'industrie du photovoltaïque reste le faible coût de fabrication des cellules solaires. Une des solutions est le recours aux cellules solaires en couches minces. Cette classe de cellules offre de grandes opportunités, à savoir un minimum de consommation de matière, le dépôt en grande surface et par conséquent une diminution du coût de production.

Dans le domaine des couches minces, il existe des filières principales : CIGS, a-Si:H, CdTe,..etc.

- Les cellules en couches minces à base silicium amorphe hydrogéné sont soit à simple jonction p-i-n ou bien à jonctions multiples. Les épaisseurs sont de l'ordre du ( $\mu\text{m}$ ) ce qui rend cette filière moins couteuse avec cependant des rendements plus faibles. Les meilleurs rendements (15 %) ont été obtenus avec des triples jonctions.
- Les cellules multi-jonctions en semi-conducteurs III-V (GaAs, AlGaAs, InGaAsP). De très bons rendements sont obtenus avec cette filière mais les coûts de fabrication sont plus élevés (bâti sous ultravide, croissance très lente). Les cellules sont destinées à des applications spatiales. Un rendement de 32% a été obtenu avec une triple jonction GaInP/GaAs/Ge sans concentrateur et 41% avec concentrateur.
- La cellule solaire chalcopyrite ( $\text{Cu-III-IV}_2$ ) engendre deux avantages essentiels pour la conversion photovoltaïque terrestre car elle répond exactement aux critères définis par cette dernière, à savoir son application en couches minces, sa tenue aux impuretés et sa stabilité à l'éclairement et même à l'effet des rayonnements cosmiques. Cette filière regroupe deux aspects : la possibilité de faire croître des couches minces polycristallines moins coûteuses et la stabilité des propriétés de conversion. Les points clés de cette filière se résument comme suit :
  - Haute efficacité.
  - Stabilité meilleure.
  - Faible coût.
  - Adaptation aux différents procédés de dépôt.

La filière chalcopyrite est considérée comme étant le marché d'avenir le plus prometteur pour la fabrication de modules photovoltaïques. Les rendements enregistrés en laboratoire ont atteint les 20 % [3] alors qu'en module il affiche 13 % [40]. Pour la matière première, l'équivalent de 0.5 à 1 kg par  $\text{m}^2$  de silicium est nécessaire pour réaliser un module

photovoltaïque conventionnel, alors que pour le  $\text{CuInSe}_2$ , la somme de 1.5 à 4 g de cuivre, 3 à 9 g d'indium et 7 à 20 g de sélénium est suffisante pour réaliser l'équivalent du silicium. Cette quantité est inférieure à la quantité de matière nécessaire pour la métallisation dans le cas des modules de silicium. Les principaux matériaux de cette filière sont le  $\text{CuInSe}_2$ ,  $\text{CuInS}_2$ ,  $\text{CuGaSe}_2$  d'énergies de gap respectives 1, 1.5 et 1.7 eV. Contrairement au silicium amorphe, les cellules à base de CIGS ne montrent aucune dégradation sous l'effet de l'exposition continue à la lumière. Pour augmenter la valeur de l'énergie du gap du  $\text{CuInSe}_2$ , qui reste un peu éloignée de la partie la plus intense du spectre solaire, le gallium a été substitué à l'indium pour modifier l'énergie pour se situer à une énergie de gap entre celle du  $\text{CuInSe}_2$  et du  $\text{CuGaSe}_2$ . On parle ainsi de composés  $\text{Cu(In,Ga)Se}_2$  qui sont devenus, de nos jours, les matériaux les plus prometteurs de cette filière.

Dans la figure (II.10) est représenté le rendement des différentes technologies de cellules solaires en couches minces (CIGS, CdTe, a-Si:H) en cellule et en module.

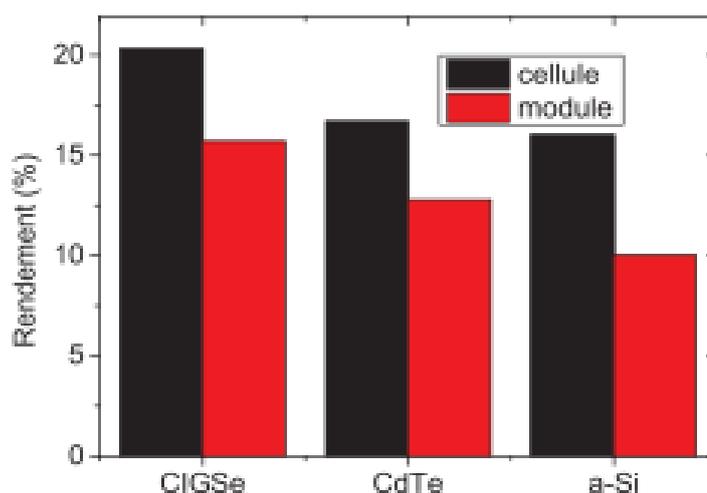


Figure II.10: Rendements de conversion des différentes technologies de cellules solaires en couche mince en cellule et en module [9].

## II.7. Cellules solaires à base de $\text{Cu(In, Ga)Se}_2$

La technologie CIGS présente actuellement le meilleur rendement de production pour une cellule et pour des modules par rapport à toutes les technologies à couches minces inorganiques[57].

Le  $\text{CuInSe}_2$  a été synthétisé pour la première fois en 1953 par Hahn. En 1974, ce matériau

a été proposé comme matériau photovoltaïque avec un rendement de conversion d'énergie de 12% pour une cellule solaire monocristalline [57]. Dans les années 1983-84, Boeing Corp. a abouti à une efficacité plus de 10% pour des films poly-cristallins minces élaborée par un procédé de co-évaporation de trois sources. En 1987, la centrale solaire Arco a atteint un rendement de 14.1%. Il a fallu plus de dix ans que les industries solaires de Siemens (aujourd'hui Shell Solar) sont entrées dans le stade de la production industrielle. En 1998, les premiers modules solaires CIGS commerciales étaient disponibles [57].

### **II.7.1. Structure de la cellule en CIGS**

Les performances des cellules solaires sont directement liées aux nombreux paramètres tels que : l'absorption du matériau de la lumière, le transport de charge, la longueur de diffusion des porteurs de charge, les états d'interfaces, etc. Une cellule solaire est composée par des couches actives constituées par des matériaux semi-conducteurs ainsi que deux électrodes métalliques. Afin d'atteindre un rendement de conversion élevé d'une cellule solaire les matériaux constituant les couches et les électrodes métalliques doivent être bien choisis tel que l'utilisation d'un absorbeur ayant un coefficient d'absorption optique élevé. Le rendement de la cellule dépend en outre de la qualité de diverses couches, autrement dit des divers procédés de croissance. La cellule solaire CIGS est composée de plusieurs couches minces et sa structure conventionnelle est représentée sur la figure II.11.

Le substrat est une plaque de verre avec une épaisseur d'environ 3 mm sur lequel est déposé un contact métallique en molybdène (Mo) (de quelque centaines de nm à 1  $\mu m$ ). Sur ce substrat est déposé une couche de 2 à 4  $\mu m$  de  $Cu(In,Ga)Se_2$  [60] dopé de type P appelée l'absorbeur, dans lequel les photons vont être absorbés et vont créer des paires électrons-trous. Cet absorbeur est recouvert d'un semi-conducteur de type N d'épaisseur 50 nm en sulfure de cadmium (CdS) qui assure la formation de l'hétérojonction. La couche fenêtre est constituée d'une couche de 50 nm d'oxyde de zinc intrinsèque (noté ZnO (i)) et d'une couche de 400 nm d'oxyde de zinc dopé à l'aluminium (noté ZnO:Al).

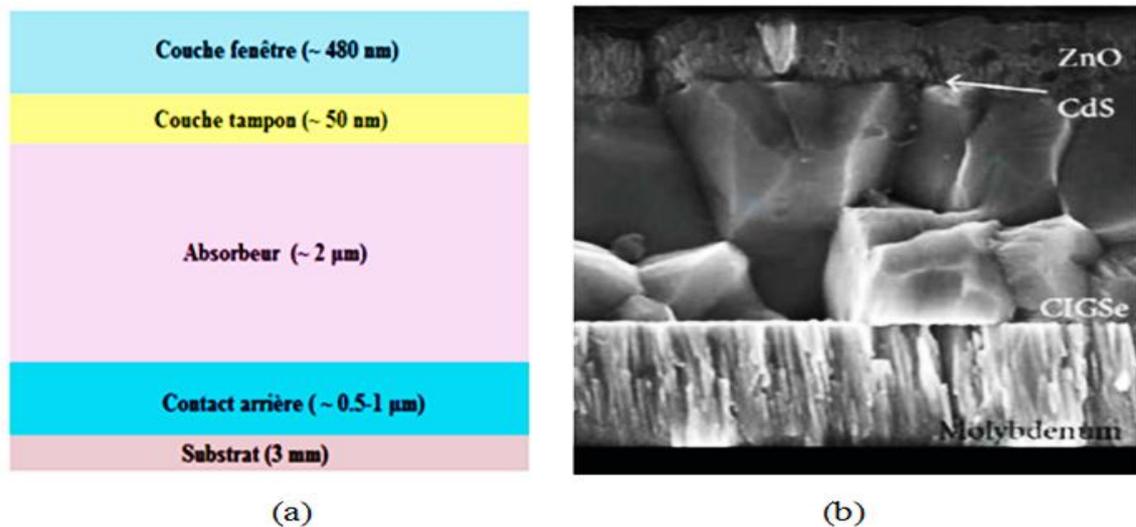


Figure II.11: (a) schéma de l'empilement des différentes couches d'une cellule en CIGS, (b) image de la tranche d'une cellule en CIGS obtenue par un microscope électronique à balayage (MEB)[61].

### II.7.1.1. Substrat

Le substrat est le support permettant la tenue mécanique des différentes couches, dont l'empilement ne dépasse pas quelques micromètres d'épaisseur.

Le tableau (II.1) représente les caractéristiques des différents substrats utilisés dans la cellule solaire à base de CIGS. Et nous observons le verre sodo-calcique est le substrat permettant d'obtenir les meilleurs rendements en laboratoire actuellement.

	Verre	Polyamide	Acier Inoxydable
Température maximale	600 °C	500 °C	Très haute
Avantages	Apport spontané de sodium	Souple Léger	Souple
Inconvénients	Poids, inhomogénéité du verre	Température de chauffe limitée, cher	Source de diffusion d'impuretés Nécessite d'une barrière isolante
Meilleurs rendements	20.3 %[3]	18.7% [62]	17.9 % [62]

Tableau II.1: Caractéristiques des différents substrats utilisés dans le monde pour le CIGS.

Le substrat le plus couramment utilisé est le verre sodocalcique, qui présente toutes les propriétés requises.

Il contient notamment du sodium, qui diffuse vers le CIGS lors de l'étape de recuit. Son effet bénéfique sur le fonctionnement de la cellule a été démontré par de nombreux auteurs [63, 64].

### **II.7.1.2. Contact arrière**

Le contact arrière jouant le rôle de l'anode de la cellule solaire est un métal déposé sur le fond de l'absorbeur pour assurer la collection des porteurs à partir de l'absorbeur et de les livrer à la charge externe. Il doit donc, répondre à certains critères chimiques, mécaniques et économiques. De nombreux métaux ont été étudiés comme le Tungstène, le Molybdène, le Chrome, le Tantale, le Manganèse [65], l'Or, l'Aluminium, l'Argent et le cuivre. Parmi ces métaux, le Molybdène qui est le plus couramment utilisé comme contact arrière des cellules solaires CIGS par les laboratoires de recherche et en industrie, en raison de sa stabilité relative aux températures élevées rencontrées lors du procédé de fabrication du CIGS (de l'ordre de 550 à 600°C), et de sa faible résistance de contact avec le CIGS. Son épaisseur est d'environ 300 nm à 1000 nm. La méthode de dépôt utilisée est la pulvérisation cathodique. La valeur typique de la résistivité de Mo est de l'ordre  $5 \times 10^{-5} \Omega \cdot \text{cm}$  ou moins. De plus, il ne réagit pas avec le CIGS ou y diffuse.

En effet, le Mo peut réagir avec le Se lors du dépôt de CIGS pour former une couche de quelques nanomètres du  $\text{MoSe}_2$ . Par conséquent, la structure CIGS/Mo devient alors CIGS/ $\text{MoSe}_2$ /Mo. Le  $\text{MoSe}_2$  est un semi-conducteur possédant un gap de 1.41 eV [66], il est plus élevé que celui du CIGS et permet ainsi, de diminuer les recombinaisons à l'interface de ces deux couches. De plus, il a pour effet de donner un comportement ohmique à l'hétéro contact CIGS/Mo[66].

### **II.7.1.3. Absorbeur en CIGS**

L'absorbeur est la partie de la cellule dans laquelle les photons vont être convertis en paires électrons-trous. Dans le cas présent, il s'agit d'un semi-conducteur de type P de la famille I-III-VI, dont les différentes variantes déjà étudiées conduisent à la formule générale suivante :  $(\text{Cu}, \text{Ag}) (\text{In}, \text{Ga}, \text{Al}) (\text{Se}, \text{S}, \text{Te})_2$ . La substitution du Cu par de l'argent, de l'indium par du gallium ou de l'aluminium, du sélénium par du soufre ou du tellure, permet de modifier les propriétés du matériau comme sa largeur de bande interdite. Le composé le plus développé en recherche et en industrie est le  $\text{Cu} (\text{In}, \text{Ga}) \text{Se}_2$  [30].

#### II.7.1.4. Couche tampon en CdS

La couche tampon à base de CdS est constituée par un semi-conducteur de type N dont la bande interdite  $E_g$  est très large par rapport à celle de l'absorbeur en CIGS. Cette couche adapte la largeur de la bande interdite entre l'absorbeur et la couche fenêtre [67] et limite les recombinaisons des porteurs à l'interface de ces deux couches. Elle permet également de protéger la surface de l'absorbeur lors du dépôt par pulvérisation cathodique de la couche de ZnO, qui peut engendrer des défauts à la surface du CIGS[68].

Plusieurs semi-conducteurs de type N dont les bandes interdites sont entre 2.0 et 3.6 eV ont été utilisés comme couche tampon pour les cellules solaires CIGS. Cependant, le CdS déposé par bain chimique (CBD) reste préféré car il donne toujours des hauts rendements [3], [6]. Néanmoins, sa largeur de bande interdite, égale à 2.4 eV relativement faible engendre des pertes optiques, de sorte que des quantités importantes de lumière sont absorbées avant de pouvoir atteindre la couche CIGS, même pour les couches de CdS aussi minces que 50 nm.

Les photons absorbés dans le CdS ne contribuent pas au photocourant, à cause de la petite longueur de diffusion des porteurs minoritaires (trous) dans le CdS, ce qui conduit à un taux élevé de recombinaison. Pour cette raison, et en plus des contraintes liées à l'utilisation du Cadmium (Cd) qui est un élément toxique, de nombreuses études sont menées pour substituer le CdS par d'autres matériaux, parmi eux, on peut citer (OH, S), Zn (O, OH), ZnS [68], [69] ou ZnSe.

Dans la figure (II.12) est représenté le rendement de conversion pour différentes couches tampons dans des cellules solaires à base de CIS/CIGS et CdTe obtenues par différentes techniques d'élaboration. Nous observons que le meilleur rendement est achevé pour des cellules solaires à base de CIS et CIGS avec une couche tampon CdS.

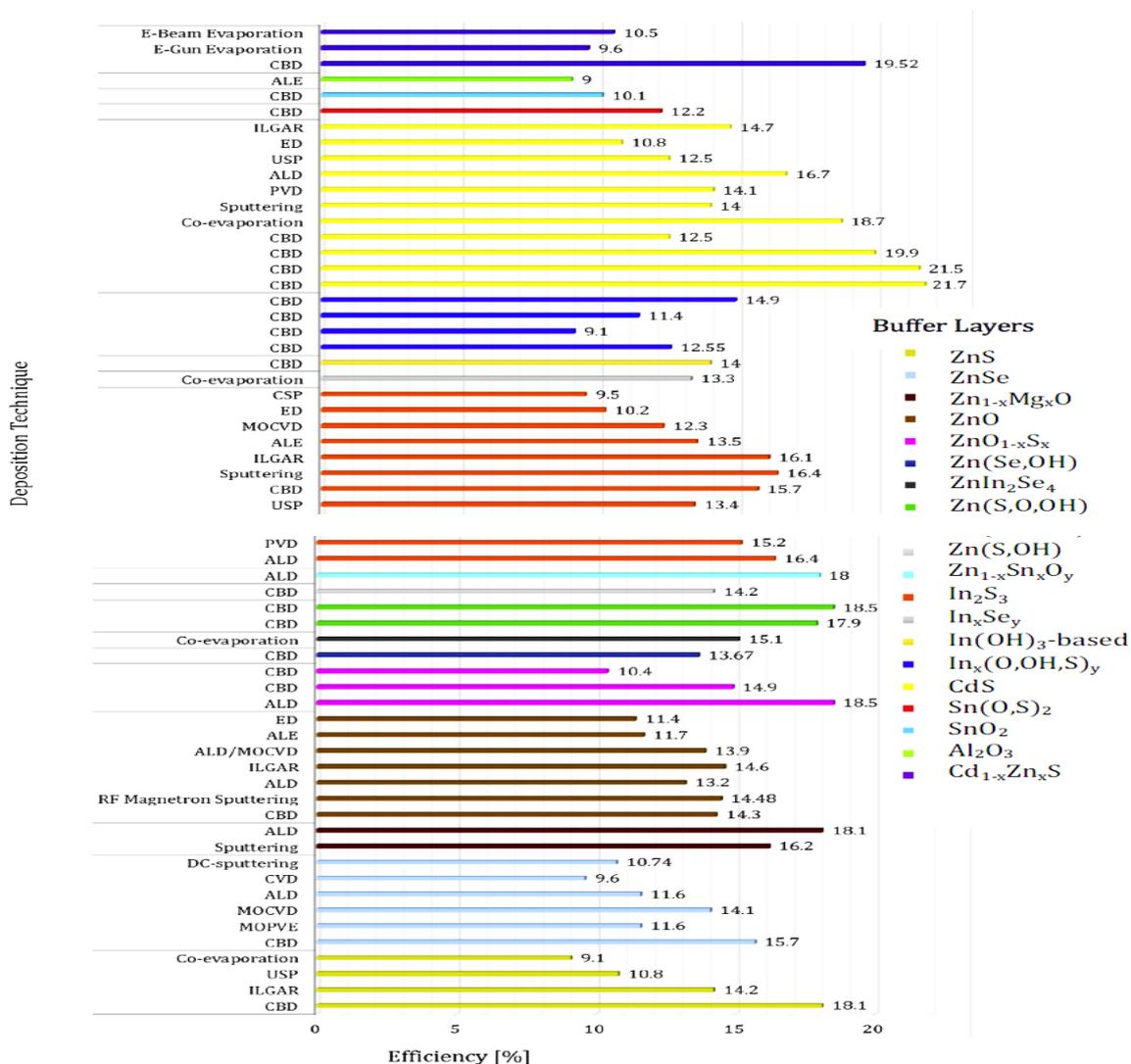


Figure II.12 : Rendements de conversion (> 9% pour une surface de la cellule ≤ 1cm<sup>2</sup>) rapportés [60] sur plusieurs couches tampons des cellules solaires à base de CIS/CIGS et CdTe obtenues par des techniques de dépôt variées.

### II.7.1.5. Couche fenêtre en ZnO

Une des deux électrodes est transparente pour permettre la transmission de la lumière suffisamment à la région de la jonction P-N et vers la couche absorbante en CIGS et conductrice pour transporter le photocourant généré par la cellule solaire au circuit extérieur. Cette électrode est une couche mince en oxyde transparent conducteur (TCO), une fine grille métallique doublée (Ni-Al) supérieure est déposée sur la couche fenêtre de façon à réduire sa résistance série et de collecter les charges générées par le dispositif. Le Ni sert de couche d'accroche et permet d'éviter l'oxydation de l'Al liée à la présence sous-jacente du TCO. Le TCO, généralement

utilisé pour les cellules CIGS, et l'oxyde de Zinc (ZnO) déposé par pulvérisation cathodique, mais l'oxyde d'Indium dopé à l'étain (ITO) peut être également rencontré[70].

Une bicouche ZnO est souvent utilisée pour le contact frontal transparent. La première couche est une couche mince de ZnO intrinsèque (i-ZnO), qui est typiquement de (50 – 100 nm) d'épaisseur et très résistive. La seconde couche est fréquemment du ZnO dopé à l'Aluminium (ZnO : Al), mais d'autres dopants comme le Bore (ZnO : B) [71] ou le Gallium (ZnO : Ga) existent aussi. Le ZnO et le ZnO : Al ont respectivement des bandes d'énergie d'environ 3.2 eV et 3.6 à 3.8 eV.

### **II.7.2. Diagramme de bande d'énergie d'une cellule solaire en CIGS**

La figure (II.13) montre le diagramme de bande d'énergie associé aux cellules solaires CIGS. La jonction électrique est formée par le contact entre le CIGS de type P et les couches CdS/ZnO de type N. Au voisinage de l'interface CIGS/CdS, les bandes d'énergie sont courbées par la variation du potentiel électrostatique à travers la jonction P-N. L'interface entre CIGS et couche tampon présente une discontinuité d'énergie positive au niveau de la bande de conduction du CIGS. Cette discontinuité doit posséder une hauteur optimale pour les performances des dispositifs [72] : trop haute, elle s'oppose au passage des électrons photogénérés, réduisant le photocourant; trop basse, voire négative, elle augmente le courant d'obscurité et les pertes par recombinaison. La couche de ZnO intrinsèque complète la couche tampon sur le plan électrique, en évitant le contact direct avec le ZnO:Al électriquement dégénéré. Du fait de largeurs de bande interdite élevée, les couches de ZnO et tampon laissent passer le rayonnement visible (d'où leur nom de couches fenêtre), qui est ensuite absorbé dans la couche de CIGS. Les caractéristiques des cellules vont donc, au final, dépendre étroitement de celles des couches individuelles et de leurs interfaces. L'augmentation, par exemple, de la largeur de bande interdite du CIGS va s'accompagner d'une augmentation de la tension de circuit ouvert au détriment du photocourant [72].

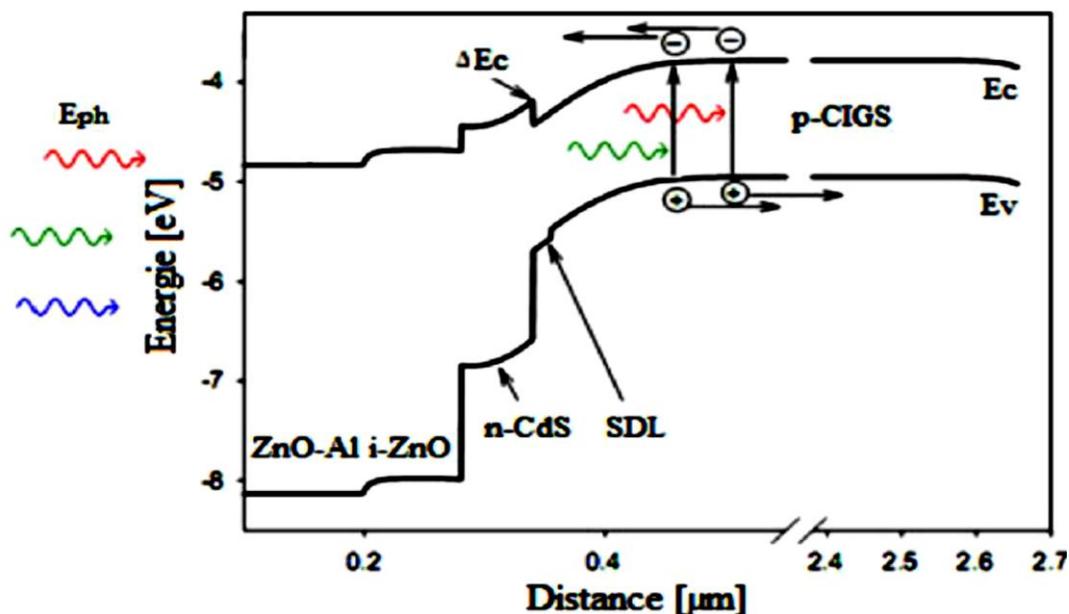


Figure II.13: Diagramme de bande d'énergie d'une cellule en CIGS/CdS/ZnO.

Contrairement aux cellules au silicium, il s'agit d'un dispositif de type hétérojonction. Le photocourant est généré dans le CIGS, puis traverse les couches de CdS/ZnO, contrairement au silicium où la couche N contribue au photo courant. L'avantage de l'hétérojonction est de limiter les pertes optiques dans la zone N d'une homojonction classique.

### II.7.3. Principe de fonctionnement physique d'une cellule solaire en CIGS

L'absorption des photons est réalisée par le CIGS. C'est un composé I-III-VI<sub>2</sub> qui cristallise dans la structure chalcopyrite et dont le rapport des éléments III (In/Ga) permet d'ajuster le gap du matériau entre 1.04 eV et 1.68 eV [11]. Son coefficient d'absorption ( $\alpha > 10^5 \text{ cm}^{-1}$ ) et son gap direct lui permettent d'absorber la plus grande partie du spectre solaire après quelques micromètres d'épaisseur (2 – 4  $\mu\text{m}$ ) [60]. Ce semi-conducteur a un dopage de type P essentiellement lié à la présence de lacunes de cuivre ( $V_{\text{Cu}}$ ) et à la présence de sodium [62].

La séparation des charges est réalisée par une hétérojonction entre l'absorbeur CIGS de type P et une couche tampon habituellement à base de sulfure de cadmium (CdS) de type N déposée par bain chimique. Du point de vue optique, la couche de CdS n'est pas idéale car avec un gap de 2.42 eV elle absorbe une partie des photons de longueur d'onde inférieure à 520 nm qui ainsi ne servent pas à la photogénération des porteurs. Cette jonction reste cependant celle qui permet d'obtenir les meilleurs rendements de conversion des cellules solaires en CIGS.

La collecte des porteurs préalablement séparés par la jonction P-N est assurée par des contacts conducteurs placés en face avant et arrière de la cellule. En face avant, c'est un oxyde transparent conducteur (TCO) qui permet de collecter les électrons, il est également appelé fenêtre optique car il doit être transparent sur la gamme spectrale utile à l'absorbeur. Ce contact est composé d'une couche d'oxyde de zinc intrinsèque (i-ZnO,  $E_g = 3.3$  eV) de 50 nm.

Le contact en face arrière (contact arrière) assure la collecte des porteurs (trous) générés dans l'absorbeur et les injecte dans un circuit extérieur. Cette couche est habituellement constituée de molybdène. C'est une couche qui doit être conductrice, former un contact ohmique avec la couche absorbante, résister aux conditions de dépôt de l'absorbeur (haute température, atmosphère sélénisée) et être mécaniquement stable sur le substrat.

Figure II.14 montre la caractéristique  $J$ - $V$  mesurée expérimentalement d'une cellule solaire en CIGS pour différentes compositions  $x=0, 0.24$  et  $0.61$  correspondantes à  $E_g = 1.02, 1.16$  et  $1.4$  eV respectivement. On remarque que  $V_{co}$  augmente et  $J_{cc}$  diminue lorsque  $E_g$  augmente.

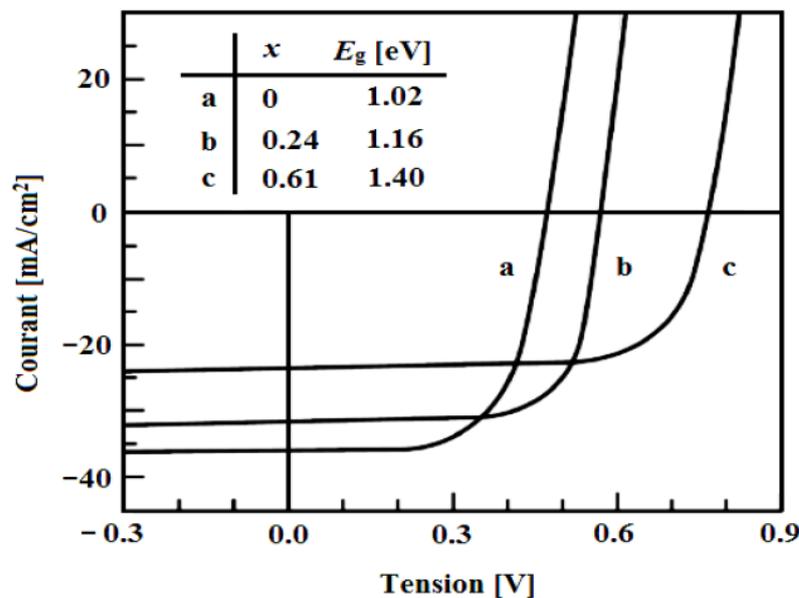


Figure II.14: Caractéristique  $J$ - $V$  mesurée d'une cellule solaire en CIGS pour trois énergies de bande interdite [73].

Le rendement quantique externe obtenu expérimentalement d'une cellule solaire en CIGS avec la variation de la composition Ga est montrée sur la figure (II.15). La réduction des performances avec une augmentation de la composition de Ga peut se justifier du fait de l'augmentation de la bande interdite de l'absorbeur et il y'aura moins de la contribution de photons, qui pénètrent plus profondément et générant le photocourant.

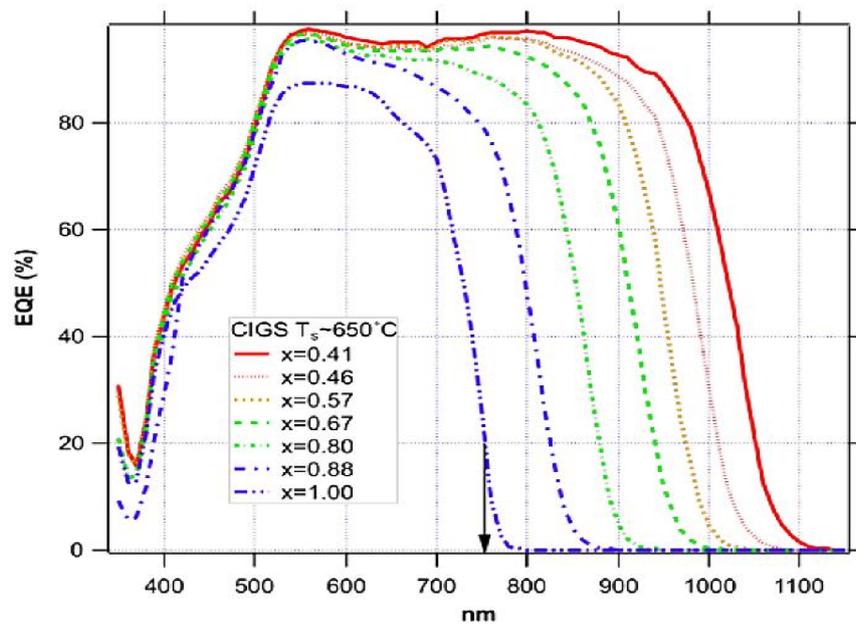


Figure II.15: Rendement quantique externe mesuré sur une cellule en CIGS pour différentes proportions x de Ga [74].

## II.8. Conclusion

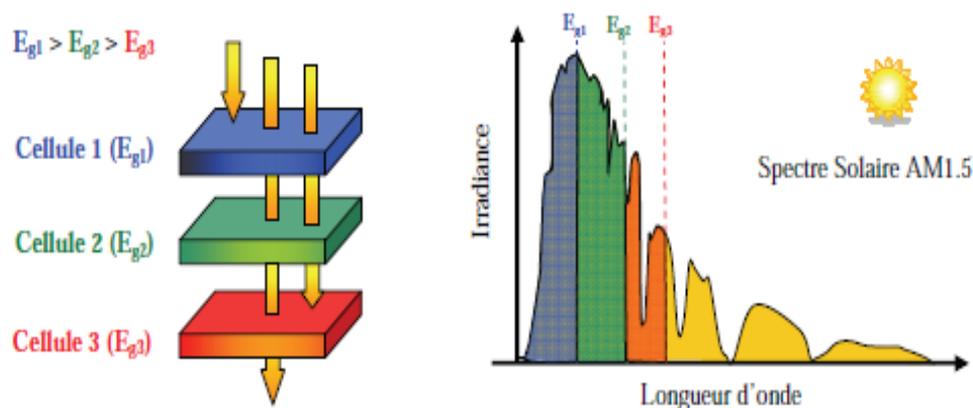
Dans le présent chapitre, nous avons présenté les bases fondamentales à la compréhension de la cellule solaire. Nous avons abordé en premier lieu quelques notions sur la source d'énergie que représentent le soleil et son application dans le domaine photovoltaïque. Nous avons ensuite poursuivi notre étude sur l'effet photovoltaïque, le principe de fonctionnement des cellules photovoltaïques, leurs caractéristiques principales ainsi que les paramètres qui influent sur leurs caractéristiques. Nous avons ensuite introduit les principaux types de cellules solaires et nous avons présenté une étude sur la structure de base et le principe de fonctionnement de la cellule solaire simple jonction à base de CIGS.

## **Chapitre III: Cellules solaires à multi-jonctions**

### III.1. Introduction

Dans ce chapitre nous allons présenter quelques notions de base indispensables pour la compréhension des cellules solaires multi-jonctions. Il est consacré au principe de fonctionnement et les configurations des cellules solaires multi-jonctions ainsi une présentation de quelques résultats des travaux de recherche sur la simulation de la cellule solaire tandem à base de CIGS.

L'objectif des cellules multi-jonctions est la réduction des deux principales causes de perte de rendement des cellules unijonction, les pertes résultant du non absorption des photons d'énergie  $h\nu < E_g$  et les pertes thermiques associées à la thermalisation des photoporteurs chauds créés par les photons d'énergie  $h\nu > E_g$ . Le concept des cellules multi-jonctions est simple: plusieurs cellules avec des gaps différents sont empilées de manière à ce que le rayonnement incident interagisse séquentiellement avec les cellules de gaps décroissants (Figure III.1). Les cellules supérieures, à grands gaps, absorbent et convertissent les photons de haute énergie, et transmettent les photons de basse énergie aux cellules sous-jacentes de gaps plus petits. Ces dernières absorbent alors et convertissent les photons de plus basse énergie. Les pertes par thermalisation sont ainsi minimisées car chaque cellule convertit des photons d'énergie  $h\nu \sim E_g$ . Entre chacune des jonctions il faut réaliser une région conductrice avec contact ohmique de part et d'autre, transparente à la gamme spectrale exploitée par les cellules sous-jacentes. Ces liaisons sont assurées par des diodes tunnel.



**Figure III.1: Principe de la cellule multi-jonctions.**

Pour les cellules multi-jonctions en semi-conducteurs III-V (GaAs, AlGaAs, InGaAsP), de très bons rendements sont obtenus avec cette filière mais les coûts de fabrication sont plus élevés (bâti sous ultravide, croissance très lente). Ces cellules sont destinées à des applications spatiales,

un rendement de 32 % a été obtenu avec une triple jonction GaInP/GaAs/Ge sans concentrateur et 41 % avec concentrateur [59].

### III.2. Configuration des cellules multijonctions

Les cellules solaires à multijonctions peuvent augmenter le rendement de la cellule en introduisant un autre semi-conducteur capable de réduire une partie des pertes par thermalisation ou par transmission. Dans cette approche quatre configurations existent : les cellules solaires à quatre terminales, les cellules solaires monolithiques à deux terminales et à trois terminales, et le système à décomposition spectrale [75–77].

#### III.2.1. Cellule tandem à quatre terminales

Les cellules sont placées sur le même trajet optique mais sont indépendantes les unes des autres. Pour séparer les cellules, on utilise une matière adhésive (matériau isolant) par exemple : le verre, du plastique ou du  $\text{SiN}_x$  qui assure une bonne isolation électrique ainsi qu'un bon couplage optique et thermique entre les couches [78-79]. Chaque cellule devient électriquement isolée des autres (Figure III.2). La connexion et l'isolation électrique entre les couches ajoutent une étape supplémentaire à sa technique de fabrication (interconnexions électriques, le couplage optique et l'emboîtement de la cellule) et augmente les pertes d'ombre.

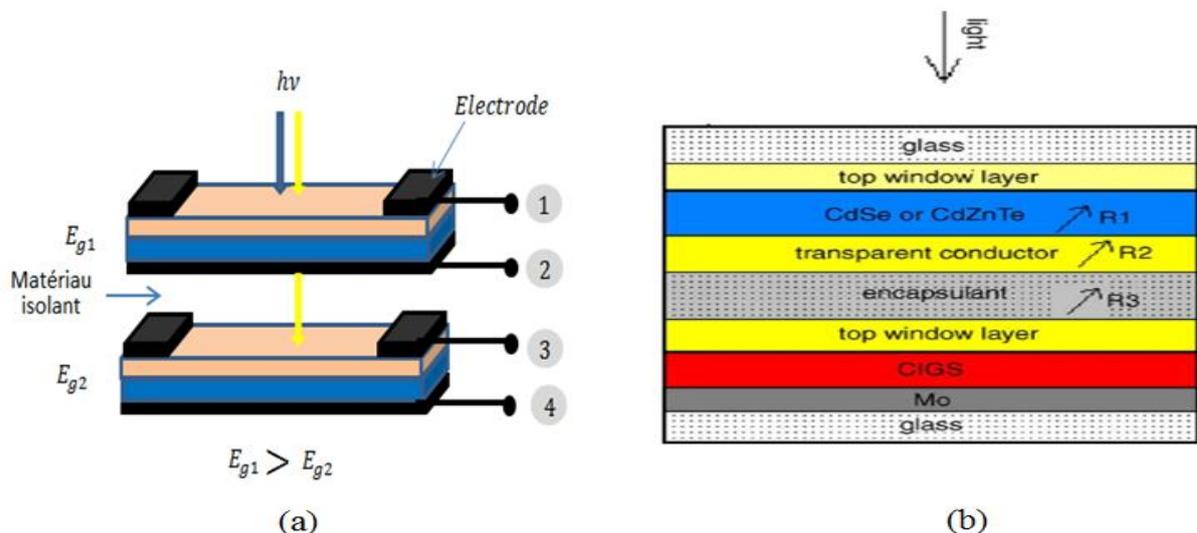
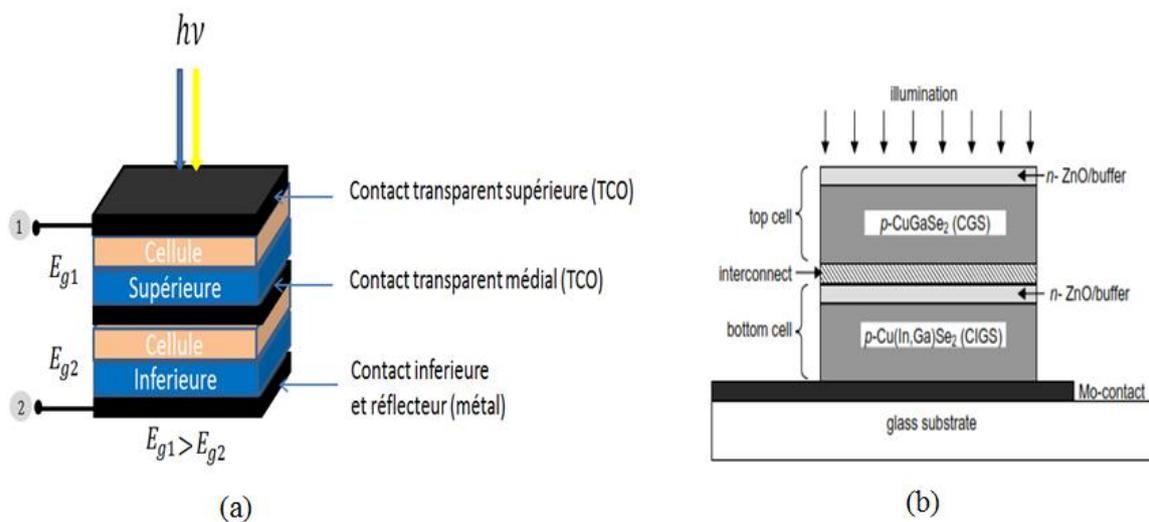


Figure III.2: Structure des cellules solaires tandem à quatre terminales : (a) schéma de principe, (b) exemple sur CdSe ou CdZnTe/CIGS[80].

### III.2.2. Cellule monolithique tandem à deux terminales

La configuration de la cellule solaire tandem monolithique à deux terminales est basée sur l'empilement de cellules (supérieure et inférieure) en série et sur le même trajet optique avec un ordre décroissant des différents gaps (Figure III.3). Cette configuration nécessite que les sous-cellules soient de la même polarité et que les photocourants entre des sous-cellules soit le même courant (Current- matching) car les performances de toute la cellule tandem sont limitées par la cellule qui débite le moins de courant [77]. En plus de la condition imposée sur l'égalité du courant, le choix du gap de chaque cellule doit être précis pour avoir un maximum de rendement. La croissance de toutes les couches sur un seul substrat et la couche conductrice transparente (TCO) est remplacée par une jonction tunnel ou par une jonction de recombinaison [79] (pour assurer une bonne connexion électrique entre les couches).



**Figure III.3: Structure d'une cellule solaire monolithique tandem à deux terminales : (a) Schéma de principe[79], (b) Exemple sur cellule solaire CGS /CIGS[81].**

### III.2.3. Cellule monolithique tandem à trois terminales

Dans la configuration de la cellule solaire tandem monolithique à trois électrodes, les sous-cellules solaires (supérieure et inférieure) du tandem ne sont pas électriquement isolées, le fond de la cellule supérieure est électriquement connecté à la partie supérieure de la cellule inférieure (Figure III.4). La fabrication d'un dispositif monolithique à trois électrodes est relativement simple, bien que plus complexe que la fabrication d'un dispositif à deux électrodes. La structure semi-conductrice doit être conçue pour fournir une couche de contact à l'électrode intermédiaire, et accueillir les étapes de traitement nécessaires pour mettre en place d'électrode intermédiaire. Avec le contact (électrode) intermédiaire, les différentes sous-cellules de tandem

ne doivent pas avoir les mêmes photocourants. De plus, dans cette configuration, les différentes sous-cellules peuvent avoir des polarités différentes, par exemple, (p/n) pour la cellule supérieure et (n/p) pour la cellule inférieure[77].

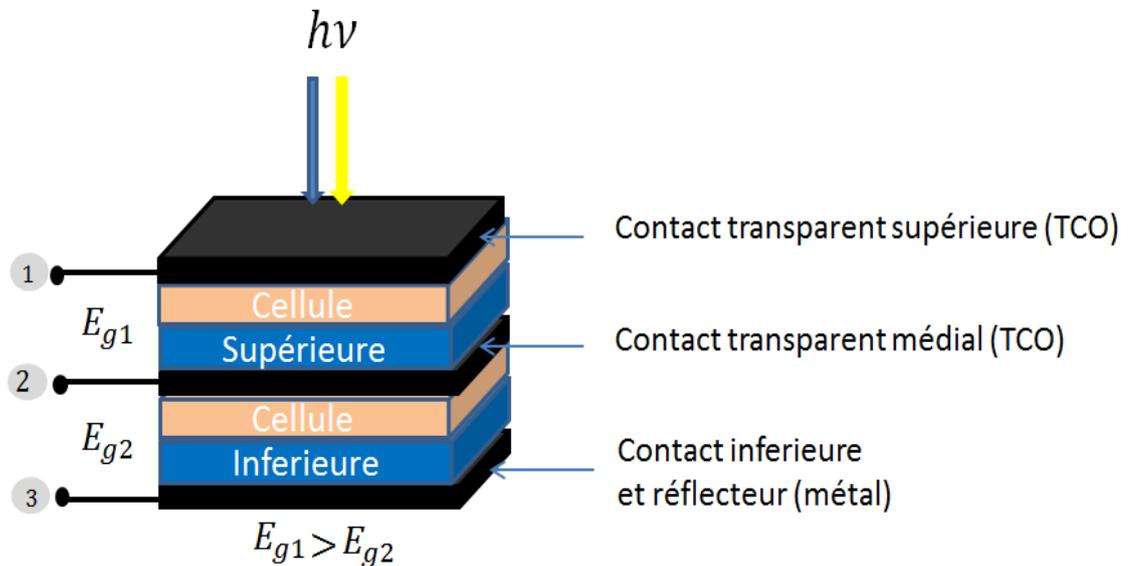


Figure III.4: Structure d'une cellule solaire monolithique tandem à trois terminales[79] .

### III.2.4. Système à décomposition spectrale

Cette conception consiste à la décomposition du spectre solaire par des prismes ou miroirs dichroïques qui laissent traverser des rayons lumineux du spectre solaire sur la cellule ayant la bande interdite appropriée (Figure III.5).

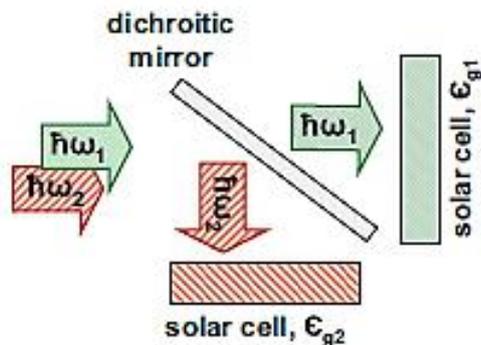


Figure III.5: Principe de la décomposition spectrale par miroir dichroïque guidant deux parties séparées du spectre lumineux et appliquées sur deux cellules solaires.

Le miroir permet ainsi une meilleure adaptation du spectre solaire au système de cellules utilisées, la connections des cellules étant indépendante. Le contrôle de la fréquence de la lumière se fait à l'aide de filtres sélectifs. L'alignement, l'efficacité du miroir, le câblage individuel de chaque cellule rend cette approche indésirable, notamment lorsque la puissance électrique délivrée augmente [77].

### III.3. Principe de la cellule solaire tandem à deux terminales

Le principe de la cellule tandem à deux terminales est illustré par la figure III.6.

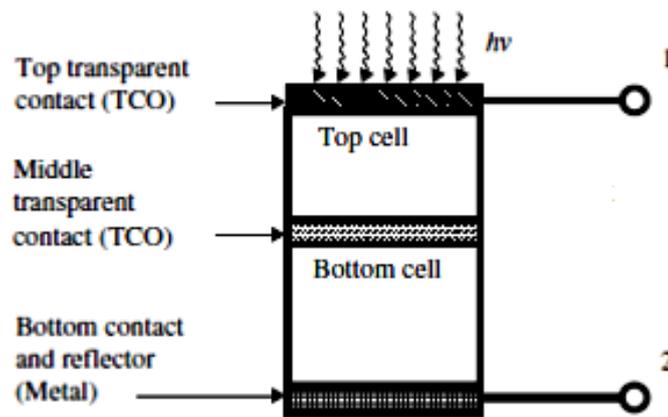


Figure III.6 : Principe d'une cellule solaire tandem

Dans une cellule solaire tandem à deux terminales, la cellule supérieure (“ top ”) et la cellule inférieure (“ bottom ”) sont électriquement en série. Si nous utilisons les notations suivantes :

$J_{sc\ tandem}, V_{oc\ tandem}$  : La densité du courant et le voltage de la cellule solaire tandem.

$J_{sc\ top}, V_{oc\ top}$  : La densité du courant et le voltage de la cellule solaire supérieure.

$J_{sc\ bottom}, V_{oc\ bottom}$  : La densité du courant et le voltage de la cellule solaire inférieure.

Il y a une différence entre  $J_{top}$  et  $J_{bottom}$ , la densité de courant de court-circuit de la cellule solaire tandem sera donnée par le plus petite valeur des deux densités de courant de court-circuit des cellules solaires supérieure et inférieure [79], [82] :

$$J_{sc\ tandem} \approx \text{Min} \{ J_{sc\ top}, J_{sc\ bottom} \} \quad \text{III.1}$$

La tension en circuit ouvert de la cellule solaire tandem est égale la somme des tensions en circuit ouvert des deux cellules supérieure et inférieure [79] :

$$V_{oc\ tandem} \approx V_{oc\ top} + V_{oc\ bottom} \quad \text{III.2}$$

Dans le cas de la condition d'égalité des courants pour des performances optimales, nous avons :

$$J_{sc\ tandem} = J_{sc\ top} = J_{sc\ bottom} \quad \text{III.3}$$

Dans le cas d'égalité des courants, le facteur de forme  $FF$  de la cellule solaire tandem peut être considéré entre les facteurs de forme  $FF$  des cellules solaires supérieure et inférieure. Cependant, dans le cas de l'inégalité des courants, le  $FF$  de la cellule tandem est très souvent plus élevé [79]. La construction du diagramme  $J(V)$  de la cellule solaire tandem est montrée dans la figure III.7.

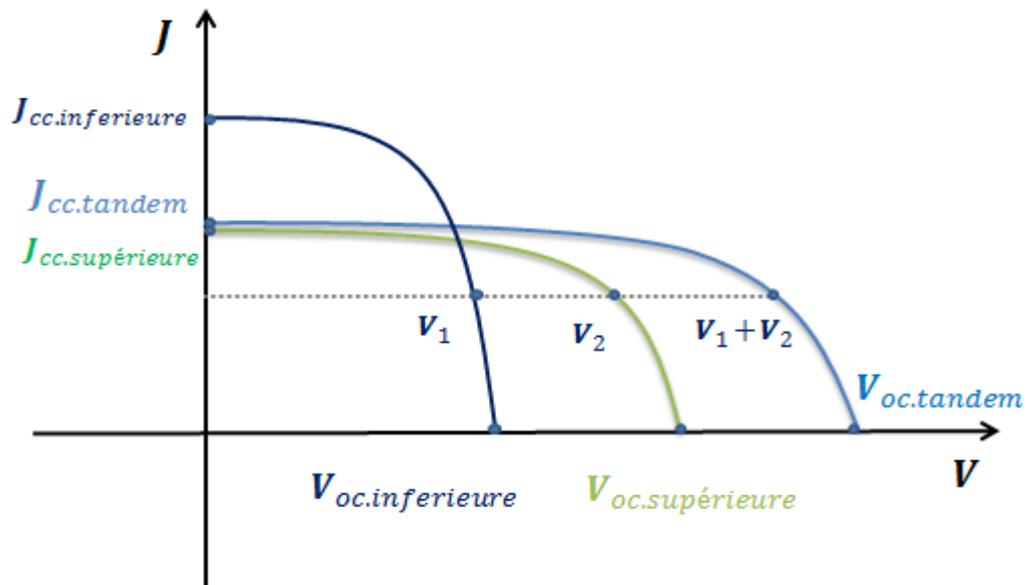
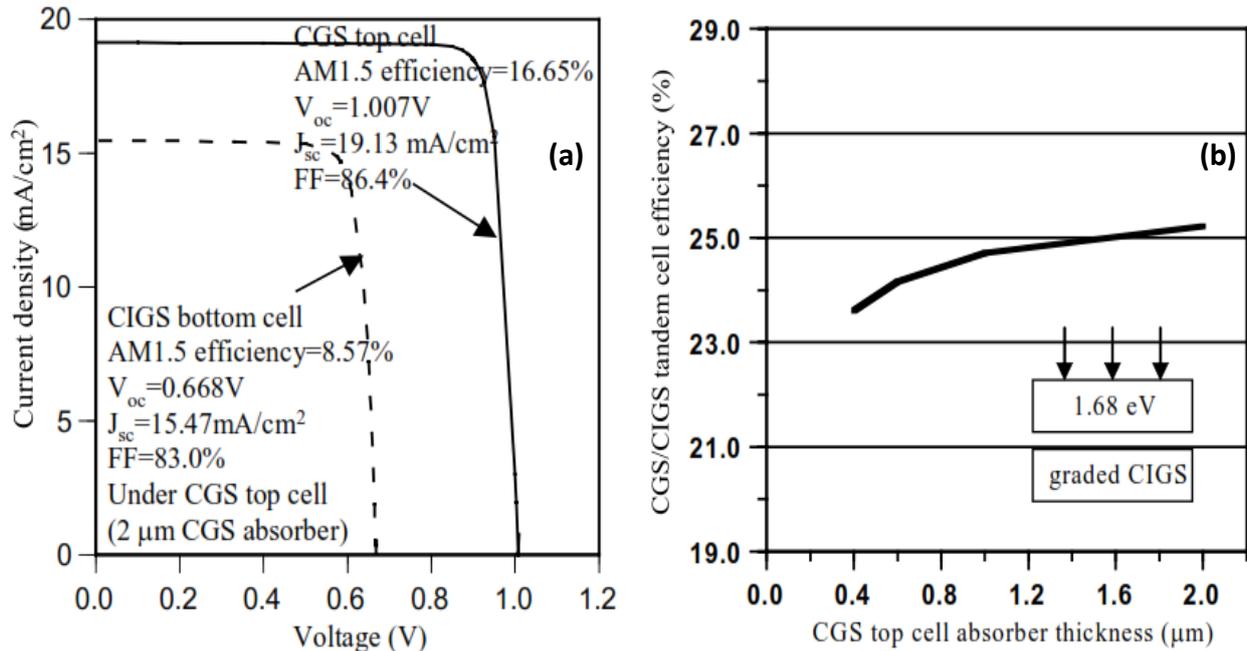


Figure III.7: Construction du diagramme  $J$ - $V$  pour une cellule solaire tandem [79].

### III.4. Etude par simulation numérique de cellules solaires tandem à base de CIGS

#### ❖ Simulation numérique d'une cellule solaire tandem CGS/CIGS par J. Song

Le travail de recherche de J. Song [13] concerne la simulation et la modélisation d'une cellule solaire tandem à base de (CGS/CIGS) en utilisant le logiciel AMPS-ID. Pour la configuration de cette cellule, il a utilisé le système à empilement mécanique ("mechanically stacked 4-terminal"). Au début, il a étudié et optimisé la cellule solaire inférieure à base de ZnO/CdS/CIGS/Mo simple jonction par la simulation numérique. Les paramètres photovoltaïques qui caractérisent la cellule solaire CIGS :  $\eta = 19.83\%$ ,  $J_{sc} = 34.42 \text{ mA/cm}^2$ ,  $V_{oc} = 0.688 \text{ V}$  et  $FF = 34.42\%$ . Ces valeurs sont en accord avec les résultats expérimentalement existants dans la littérature. Ensuite et pour la configuration de la cellule solaire tandem par empilement mécanique, il a trouvé que le maximum de rendement de conversion est réalisé en variant l'épaisseur de l'absorbeur CGS dans la cellule tandem.



**Figure III.8: (a) Les courbes J-V simulées de la cellule supérieure en CGS et la cellule inférieure en CIGS de la cellule tandem en CGS/CIGS empilées mécaniquement. (b) La performance d'une cellule tandem en CGS/CIGS en fonction de l'épaisseur de l'absorbeur de la cellule supérieure en CGS[13].**

Les résultats de la simulation montrent qu'il est possible d'obtenir un rendement de conversion de 25% dans la cellule tandem CGS/CIGS optimisée. La variation de rendement de conversion en fonction de l'épaisseur de CGS est présentée dans la figure (III.8b).

La figure (III.8.a) représente les caractéristiques (J-V) simulées de la cellule supérieure en CGS et la cellule inférieure en CIGS de la cellule tandem CGS/CIGS pour l'épaisseur de la couche CGS optimale ( $2\mu\text{m}$ ).

Dans le cas d'optimisation des structures des cellules supérieure et inférieure, les résultats de la simulation de sous-cellules de la cellule tandem sont : une cellule supérieure CGS ayant un rendement de conversion de 16.65% ( $J_{sc} = 19.13\text{ mA}/\text{cm}^2$ ,  $V_{oc} = 1.007\text{ V}$  et  $FF = 86.4\%$ ) avec une faible densité des défauts de l'absorbeur CGS ( $10^{13} \sim 10^{14}\text{ cm}^{-3}$ ) et une cellule inférieure CIGS avec un rendement de conversion de 8.57% ( $J_{sc} = 15.47\text{ mA}/\text{cm}^2$ ,  $V_{oc} = 0.688\text{ V}$  et  $FF = 83.0\%$ ).

❖ Simulation de la cellule solaire tandem à base de CdZnTe/CIGS par Y. G. Xia

Y. G. Xia [14] a étudié les performances ( $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ ,  $FF$ ,  $\eta$ ) de la cellule tandem en (CdZnTe/CIGS) ayant la configuration monolithique à deux contacts par le simulateur APSYS, la structure simulée est composée par deux cellules solaires inférieure en (CIGS) et supérieure en (CZT) connectées entre elles par une jonction tunnel. La structure de la cellule solaire tandem en (CZT/CIGS) est représentée par la Figure III.9.

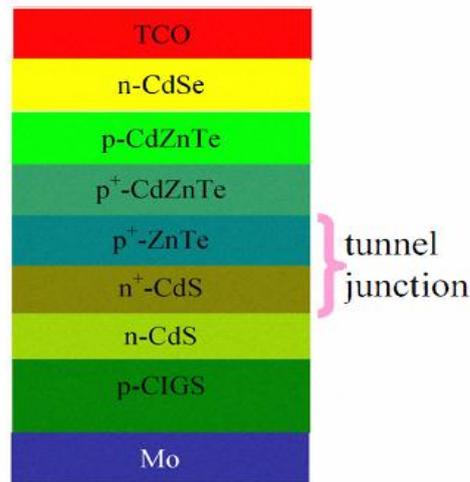


Figure III.9: Schéma d'une cellule solaire tandem à deux contacts avec jonction tunnel à base de CZT/CIGS.

Les paramètres des matériaux de la structure de cellule solaire simple jonction en CdS/CIGS utilisés (figure (III.10 a)). Les résultats de simulation sont montrés dans la figure (III.10b).

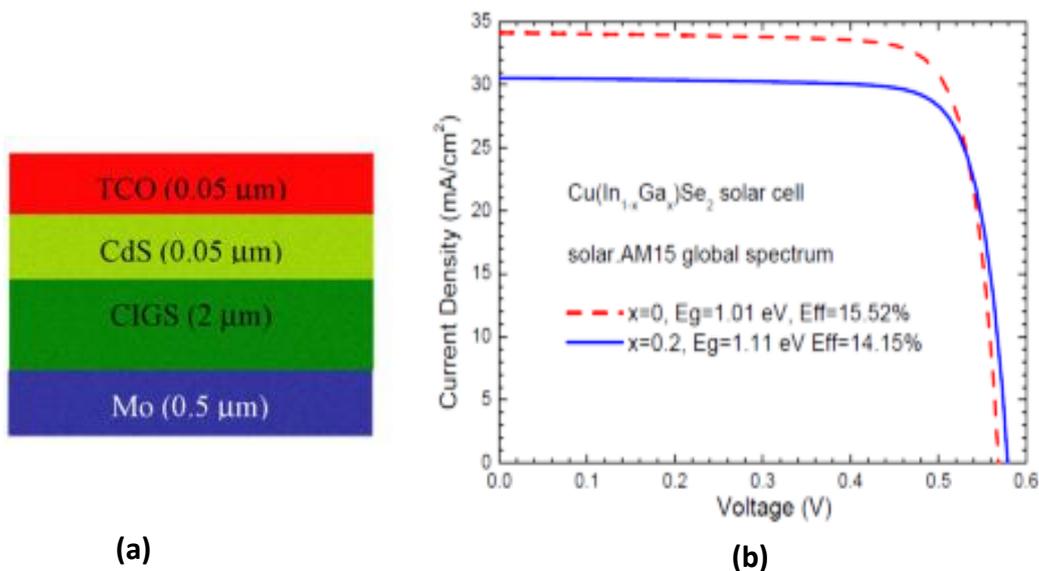
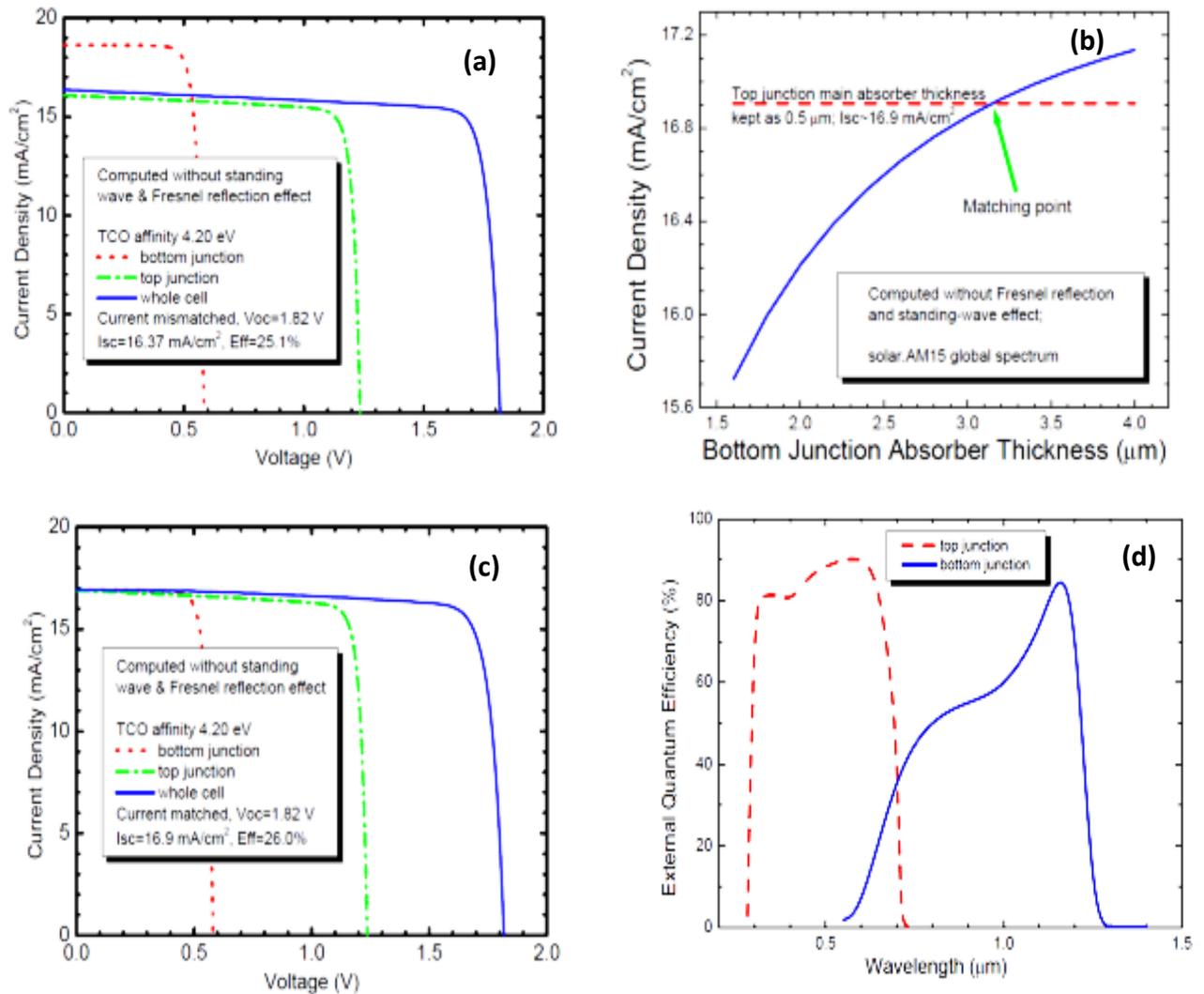


Figure III.10: (a) Schéma d'une cellule solaire en CdS/CIGS simulée dans APSYS. (b) Caractéristique J(V) de la cellule solaire en CIGS.

Les résultats de simulation de la cellule solaire tandem en (CZT/CIGS) à deux contacts sont montrés dans la figure (III.11).



**Figure III.11: (a) Caractéristiques (I-V) pour les cellules solaires : supérieure et inférieure et tandem en CZT/CIGS dans le cas nom optimal. (b) Densités de courant de court-circuit des cellules supérieure en CZT et inférieure en CIGS en fonction de l'épaisseur de la couche inférieure en CIGS dans des cellules solaires tandem. (c) Caractéristiques I-V pour les cellules solaires : supérieure et inférieure et tandem en CZT/ CIGS dans le cas optimal. (d) EQE de la cellule solaire tandem en CZT/CIGS en fonction de la longueur d'onde[14].**

Dans la figure III.11(a) sont les caractéristiques de la cellule solaire tandem en (CZT/CIGS) avant optimisation:  $\eta = 25.1\%$ ,  $J_{sc} = 16.37 \text{ mA/cm}^2$ ,  $V_{oc} = 1.82 \text{ V}$ . Pour optimiser la structure et assurer la condition d'égalités de courants ("current matching"), il a étudié les densités de courant de court-circuit des cellules supérieure en CZT et inférieure en CIGS en fonction de l'épaisseur de la couche inférieure en CIGS dans la cellule solaire tandem

tout en maintenant l'épaisseur de la couche supérieure en CZT fixée à  $0.5 \mu\text{m}$  (figure III.11.b). L'épaisseur optimale de la couche inférieure CIGS est de  $3.2 \mu\text{m}$ . Cette épaisseur assure la condition d'égalité des courants de court-circuit de la cellule solaire supérieure en CZT, de la cellule solaire inférieure en CIGS et de la cellule solaire tandem en (CZT/CIGS), les trois densités de courant de court-circuit sont égales à  $16.9 \text{ mA/cm}^2$ .

La caractéristique électrique  $J(V)$  de la cellule solaire tandem avec l'épaisseur optimale ("current matching") est représentée sur la figure (III.11.c) :  $\eta=26\%$ ,  $J_{sc} = 16.9 \text{ mA/cm}^2$ ,  $V_{oc} = 1.82 \text{ V}$ .

Les courbes du rendement quantique externe (EQE) en fonction de la longueur d'onde pour les cellules supérieure, inférieure dans la cellule solaire tandem dans le cas optimal sont représentées sur la Figure (III.11.d).

❖ **Simulation numérique de la cellule solaire tandem à base de  $\text{Cu(In,Ga)Se}_2$  par Kihwan Kim**

Kihwan Kim [82] a étudié les caractéristiques de la cellule solaire tandem en (CIGS/CIS) par le simulateur SCAPS-1D. La structure simulée (Figure III.12) est composée par deux cellules solaires inférieure en CIS et supérieure en CIGS, la conception de cette cellule en tandem se compose d'une hétéro-jonction supérieure n-CdS/p-CIGS et d'une hétérojonction inférieure n-CdS/p-CIS, qui sont connectées optiquement et électriquement par une couche en ZnO transparente.

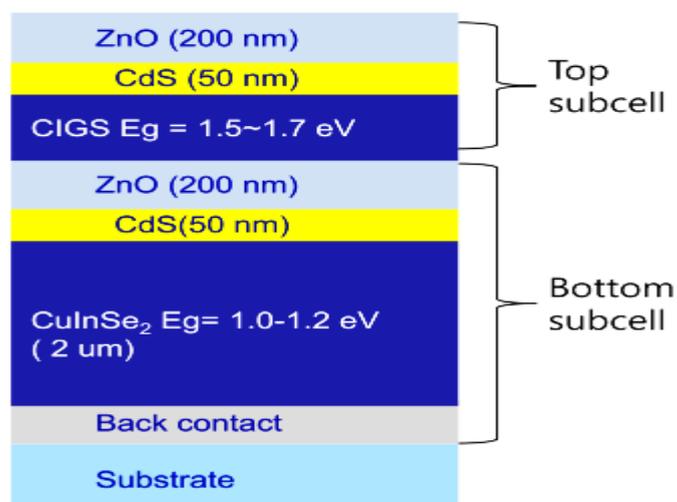


Figure III.12: Schéma d'une cellule solaire à double jonction simulée

Au début de la simulation, il a étudié l'effet de gap d'énergie qui varie entre (1.0-1.2 eV) pour la cellule inférieure et (1.4-1.7 eV) pour la cellule supérieure. Les résultats de simulation sont représentés sur la figure (III.13) et le tableau (III.1).

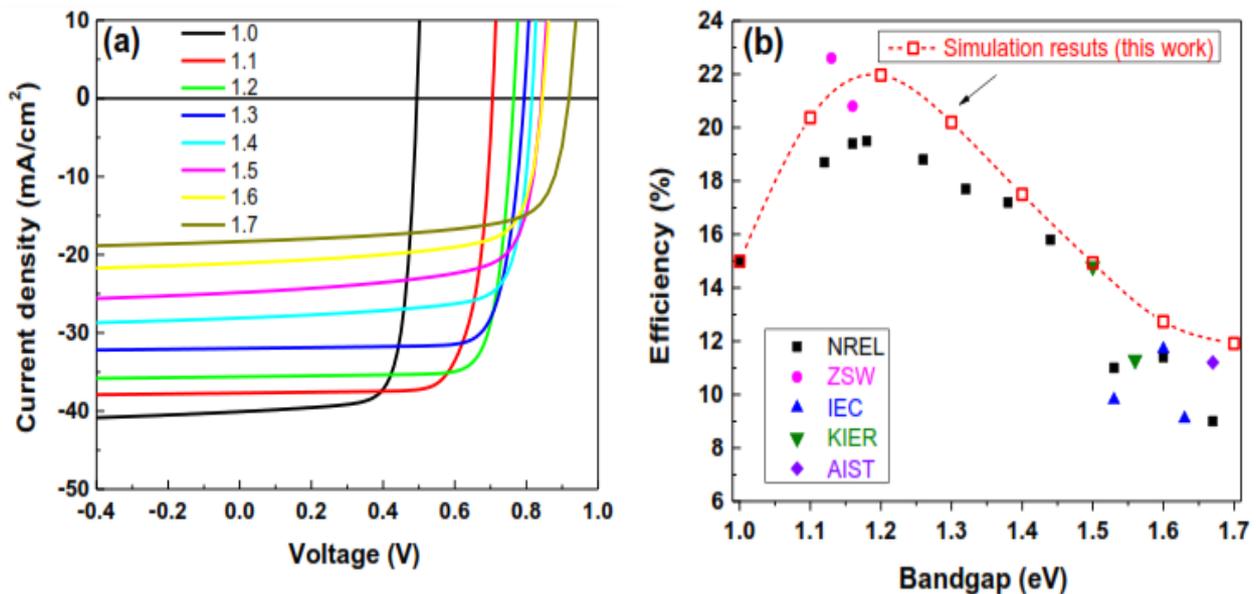


Figure III.13: (a) Caractéristiques (J-V) en fonction de gap d'énergie ( $E_g$ ) qui varie entre 1.0 eV à 1.7 eV; (b) différents résultats de simulation de rendement en fonction de gap d'énergie ( $E_g$ )[82].

Les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire en CdS/CIGS simulés sont montrés dans le tableau (III.1).

Les meilleurs résultats de simulation de la cellule inférieure sont obtenus avec un gap d'énergie  $E_g = 1.2$  eV correspondant à un rendement de conversion de 22.2%.

Tableau III.1 : les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire en CdS/CIGS simulés avec différents valeurs de gap d'énergie  $E_g$ [82].

$E_g$	$J_{cc}(mA/cm^2)$	$V_{co}(V)$	$FF(\%)$	$\eta(\%)$
1.0	40.1	0.494	75.6	15.0
1.1	38.1	0.706	75.5	20.3
1.2	36.7	0.765	80.5	22.2
1.3	32.0	0.794	79.5	20.2
1.4	28.1	0.816	76/3	17.5
1.5	24.8	0.843	71.3	14.9
1.6	21.1	0.86	71.5	12.7
1.7	18.3	0.919	70.7	11.9

Les résultats de simulation sont représentés dans la figure (III.14) pour la cellule solaire tandem CIGS/CIS dans deux cas différents : (a), ce cas se présente lorsque les deux courants de court-circuit sont différents dans la cellule solaire supérieure et inférieure et (b), dans ce cas il y'a égalité des deux courants de court-circuit dans la cellule solaire supérieure et la cellule inférieure par ajustement du gap d'énergie  $E_g$  de la cellule supérieure. Le rendement optimum obtenu par simulation de la cellule tandem est de 26.7 % en ne tenant pas compte des pertes parasites optiques et électriques dans la simulation.

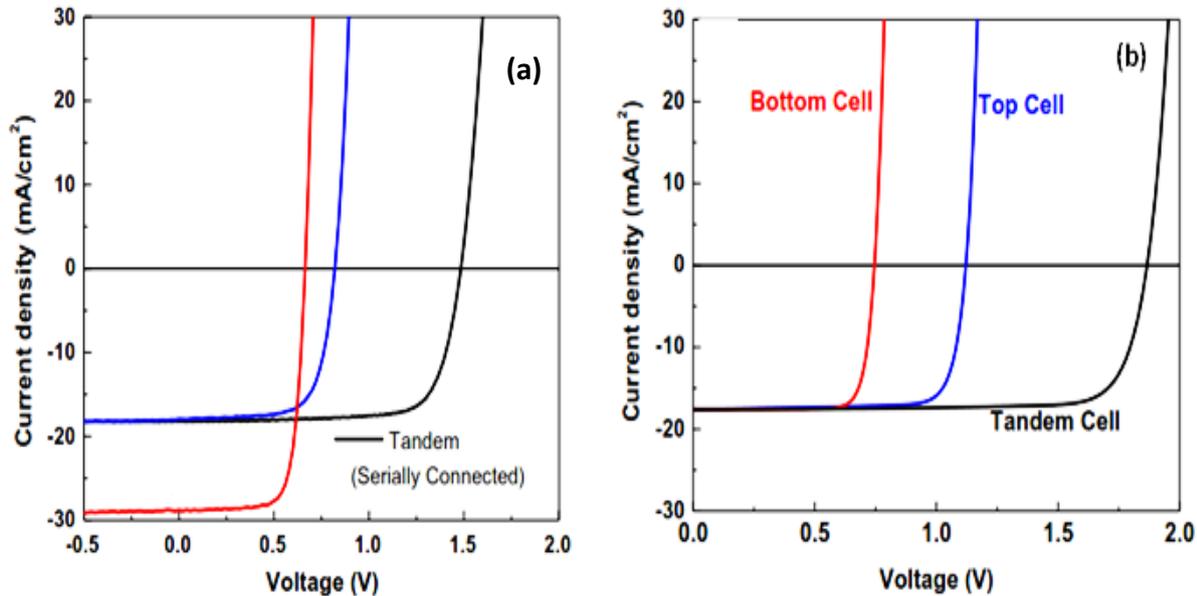


Figure III.14: Caractéristiques (J-V) de la cellule solaire tandem (CIS/CIGS) (a) :  $E_{gtop} = 1.6 \text{ eV}$ ,  $E_{gbottom} = 1.2 \text{ eV}$ , (b) :  $E_{gtop} = 1.7 \text{ eV}$ ,  $E_{gbottom} = 1.2 \text{ eV}$ [82].

### III.5. Conclusion

Ce chapitre présente quelques notions de base indispensables sur les cellules solaires multi-jonction. Dans la première partie, nous avons abordé les technologies des cellules solaires à multijonctions, en décrivent leurs structures et les configurations avec différentes approches. Ensuite, la deuxième partie est consacrée au principe de la cellule tandem. Enfin, nous concluons par quelques résultats des travaux de recherches de la simulation de la cellule solaire tandem à base de CIGS, les résultats obtenus par simulation des caractéristiques (J-V) et son rendement de conversion.

**Chapitre IV: Modélisation et simulation numérique des  
cellules solaires**

## IV.1. Introduction

Le fonctionnement d'un dispositif à semiconducteur est modélisé par un ensemble d'équations différentielles couplées et non linéaires (l'équation de Poisson et les équations de continuités des électrons et des trous). Le simulateur ATLAS produit des solutions numériques en calculant les valeurs des inconnues (concentration des électrons, concentration des trous et le potentiel) sur un maillage des points dans le dispositif après discrétisation interne des équations non linéaires.

Dans ce chapitre, nous commencerons par décrire en détail les équations fondamentales dans les semi-conducteurs : l'équation de Poisson, les équations de continuité et les équations de transport. Comme le simulateur ATLAS comprend plusieurs modèles pour les phénomènes physiques ayant lieu dans un dispositif électronique, nous allons présenter quelques modèles qui ont été utilisés dans la simulation.

Dans une seconde partie, nous allons présenter le logiciel de simulation TCAD-SILVACO utilisé dans notre travail de simulation de la cellule solaire, son mode de fonctionnement et ses différentes commandes (instructions) nécessaires pour la programmation dans ATLAS. Des résultats de notre simulation de la structure de la cellule CIGS par le simulateur ATLAS seront aussi présentés dans ce chapitre.

## IV.2. Equations fondamentales du simulateur ATLAS

Des années de recherche dans la physique des dispositifs à base de semiconducteurs ont conduit à la réalisation des modèles mathématiques qui sont capable d'opérer dans quasiment n'importe quel dispositif électronique.

Un ensemble fondamental d'équations rassemblent le potentiel électrostatique et les densités de porteurs de charge dans un domaine de simulation bien précis. Ces équations, qui sont résolues via des logiciels spécifiques de simulation des dispositifs à base de semi-conducteurs, sont dérivées des équations de Maxwell. Elles sont principalement : L'équation de Poisson, les équations de continuité et les équations de transport. L'équation de Poisson lie les variations dans le potentiel électrostatique aux densités locales de charge. Les équations de continuité ou de transport décrivent le mode par lequel les densités d'électrons et des trous se comportent en fonction des processus de transport, de génération et de recombinaison.

### IV.2.1. Equation de Poisson

L'équation de Poisson montre une relation entre le potentiel et la densité des porteurs [24]:

$$\text{div}(\varepsilon \nabla \psi) = -\rho \quad \text{IV. 1}$$

Où  $\psi$  représente le potentiel électrostatique,  $\varepsilon$  la permittivité électrique,  $\rho$  est la densité volumique nette de charges libres.

Le champ électrique est donné par la relation :

$$\vec{E} = -\overrightarrow{\text{grad}}(\psi) \quad \text{IV. 2}$$

### IV.2.2. Equations de continuité

Les équations de continuité pour les électrons et les trous sont[24]:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = +\frac{1}{q} \text{div} \vec{J}_n + G_n - R_n \quad \text{IV. 3}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \text{div} \vec{J}_p + G_p - R_p \quad \text{IV. 4}$$

Où  $J_n$  et  $J_p$  sont les densités de courant des électrons et des trous,  $G_n$  et  $G_p$  les taux de génération pour les électrons et les trous,  $R_n$  et  $R_p$  les taux de recombinaisons pour les électrons et les trous.

Nous travaillons en régime permanent où la variation par rapport au temps est nulle, alors nous avons :

$$-\frac{1}{q} \text{div} \vec{J}_n = G_n - R_n \quad \text{IV. 5}$$

$$\frac{1}{q} \text{div} \vec{J}_p = G_p - R_p \quad \text{IV. 6}$$

### IV.2.3. Equations de transport

Les dérivations basées sur la théorie de transport de Boltzmann ont prouvé que la densité des courants dans les équations de continuité peut être définie par le modèle de drift-diffusion. Dans ce modèle, les densités de courants sont exprimées en fonction des quasi-niveaux de Fermi, un pour les électrons et un pour les trous,  $\phi_n$  et  $\phi_p$ , par les expressions :

$$\vec{J}_n = -qn\mu_n \nabla \phi_n \quad \text{IV. 7}$$

$$\vec{J}_p = -qp\mu_p \nabla \phi_p \quad \text{IV. 8}$$

Avec  $q$  est la charge électrique,  $\mu_n$  et  $\mu_p$  sont les mobilités des électrons et des trous.

Les expressions pour les concentrations des électrons et des trous sont[24]:

$$n = n_i \exp\left[\frac{q(\psi - \phi_n)}{KT}\right] \quad \text{IV. 9}$$

$$P = n_i \exp\left[\frac{-q(\psi - \phi_p)}{KT}\right] \quad \text{IV. 10}$$

En introduisant ces équations dans les expressions de densité de courant, on obtient[24]:

$$\vec{J}_n = qD_n \nabla n - qn\mu_n \nabla \psi - n\mu_n KT \nabla \ln(n_i) \quad \text{IV. 11}$$

$$\vec{J}_p = qD_p \nabla p - qp\mu_p \nabla \psi + p\mu_p KT \nabla \ln(n_i) \quad \text{IV. 12}$$

Où  $D_n$  et  $D_p$  sont les coefficients de diffusion. Ils sont directement reliés aux mobilités des porteurs par la relation d'Einstein :

$$D_n = \frac{kT}{q} \mu_n \quad \text{IV. 13}$$

$$D_p = \frac{kT}{q} \mu_p \quad \text{IV. 14}$$

Les densités de courants sont exprimées en deux termes. Le premier correspond à l'entraînement des charges par le champ électrique, le second correspond à la diffusion des porteurs[24]

$$\vec{J}_n = qn\mu_n \vec{E} + qD_n \nabla n \quad \text{IV. 15}$$

$$\vec{J}_p = qp\mu_p \vec{E} - qD_p \nabla p \quad \text{IV. 16}$$

#### **IV.2.4. Recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH)**

Les recombinaisons SRH se produisent lorsque des impuretés et défauts (pièges) présents dans le semiconducteur qui provoquent l'apparition de niveaux d'énergie discrets dans la bande interdite. Ces niveaux profonds peuvent interagir avec les deux bandes de conduction et de valence et donnent lieu à la recombinaison indirecte. Par exemple, un électron libre peut être piégé dans un niveau profond ou il se recombinera, plus facilement, avec un trou de la bande de valence. Ce mécanisme est dominant dans les cellules basées sur des matériaux quaternaires et polycristallins comme le CIGS. Le taux de recombinaison par ce mécanisme pour un piège d'énergie  $E_p$  vaut [20] :

$$R_{SRH} = \frac{pn - n_i^2}{\tau_{SRH,n} \left( p + n_i \exp\left[\frac{E_i - E_p}{KT}\right] \right) + \tau_{SRH,p} \left( n + n_i \exp\left[\frac{E_p - E_i}{KT}\right] \right)} \quad \text{IV.17}$$

Avec  $\tau_{SRH,n}, \tau_{SRH,p}$  les durées de vie de chaque type de porteurs et  $E_i$  le niveau de Fermi dans le semiconducteur intrinsèque.

La durée de vie des électrons peut s'exprimer comme suit :

$$\tau_{SRH,n} = \frac{1}{\sigma_n v_{th} N_p} \quad \text{IV.18}$$

Avec  $\sigma_n$  la section efficace de capture des électrons par le piège considéré,  $v_{th}$  la vitesse thermique des électrons et  $N_p$  la densité de pièges d'énergie  $E_p$ . Ainsi, la durée de vie des porteurs sera réduite si la densité de pièges augmente. Il est donc évident qu'un matériau présentant plus de défauts structurels ou d'impuretés présentera un taux de recombinaisons SRH élevé. Les expressions précédentes étant valables pour un piège avec une énergie donnée, le taux total de recombinaisons SRH vaut :

$$R_{SRH} = \sum \tau_{SRH,i} \quad \text{IV.19}$$

Chaque  $i$  étant un piège avec un niveau d'énergie  $E_{p,i}$  dans la bande interdite.

#### IV.2.5. Recombinaisons surfaciques et au contact

Des niveaux d'énergie d'états spécifiques (états de surface), provenant de phénomènes intrinsèques (des liaisons non satisfaites des atomes de surface, disparition de la périodicité du réseau, adsorption d'atomes étrangers), peuvent se situer dans la bande interdite. Certains de ces états jouent également le rôle de centres de recombinaison. La surface d'un semi-conducteur est un lieu où les recombinaisons sont nombreuses. Le taux de recombinaison Shockley-Read-Hall en surface est donné par l'expression suivante [20],[24] :

$$R_{surf} = \frac{pn - n_i^2}{\tau_p^{eff} \left[ n + n_i^2 \exp\left(\frac{E_t - E_i}{kT}\right) \right] + \tau_n^{eff} \left[ n + n_i^2 \exp\left(\frac{-(E_t - E_i)}{kT}\right) \right]} \quad \text{IV.20}$$

Où

$$\frac{1}{\tau_n^{eff}} = \frac{1}{\tau_n^i} + \frac{d_i}{A_i} S_n \quad \text{IV.21}$$

$$\frac{1}{\tau_p^{eff}} = \frac{1}{\tau_p^i} + \frac{d_i}{A_i} S_p \quad \text{IV.22}$$

$\tau_n^{eff}$  est la durée de vie effective,  $\tau_n^i$  et  $\tau_p^i$  sont les durées de vie en volume du nœud  $i$ , les paramètres  $d_i$  et  $A_i$  sont la longueur et l'épaisseur de l'interface au nœud  $i$ .  $S_n$  et  $S_p$  sont les vitesses de recombinaison en surface pour les électrons et les trous respectivement.

### IV.3. Logiciel de simulation TCAD-SILVACO

Le logiciel TCAD (Technology Computer Aided Design)-SILVACO (SiliconValley Corporation) est un logiciel de simulation 2D/3D basé sur la méthode des éléments finis, a été fondé en 1984 par le Dr. Ivan Pesic [83] qui a exposé les outils d'extraction des paramètres d'une structure UTMOS. Ce logiciel peut modéliser non seulement des comportements électriques, optiques et thermiques des dispositifs, mais aussi des processus technologiques des structures électroniques comme le dépôt, la gravure, et le dopage par implantation ou diffusion. En conséquence, ces simulations permettent d'optimiser les différents paramètres de fabrication et de prévoir le comportement des dispositifs semiconducteurs, notamment les cellules solaires. Ces outils peuvent être divisés en deux catégories : outils de cœur et outils interactifs.

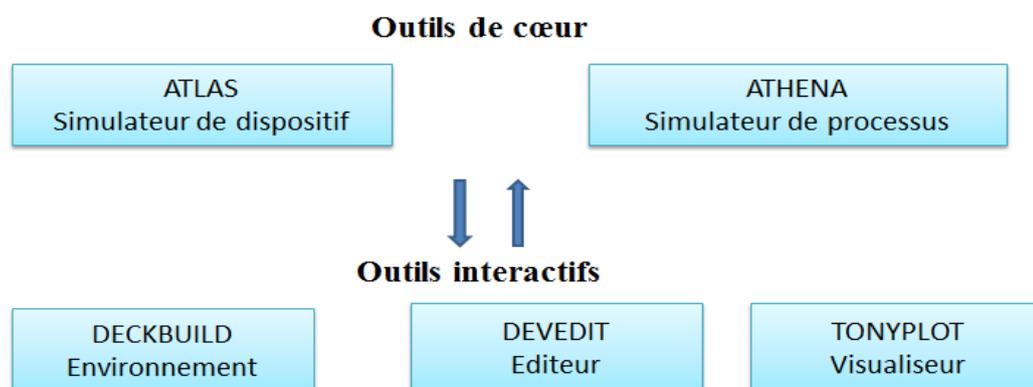


Figure IV.1: Différents outils de TCAD-SILVACO

#### ❖ Outils de cœur :

Ce sont les simulateurs qui réalisent les fonctions pour lesquelles ils sont destinés. Par exemple, ATLAS est un simulateur du comportement électrique de dispositif, et ATHENA est un simulateur de processus technologique.

#### ❖ Outils interactifs :

Ce sont des outils qui nous permettent de communiquer avec les simulateurs et de visualiser les résultats obtenus. Nous citons, entre autre, DECKBUILD, DEVEDIT et TONYPLOT. DECKBUILD est l'environnement où est défini le programme de simulation à travers des commandes spécifiques. De multiples simulateurs considérés comme des entrées peuvent être utilisés avec DECKBUILD : ATHENA, ATLAS, SSUPREM3, etc. L'affichage des résultats de

simulation tels que les paramètres technologiques (profondeur de jonction, concentration des porteurs) et même les paramètres électriques (tension de seuil, courant, etc.) est effectué à l'aide d'une fenêtre d'information (figure IV.2).

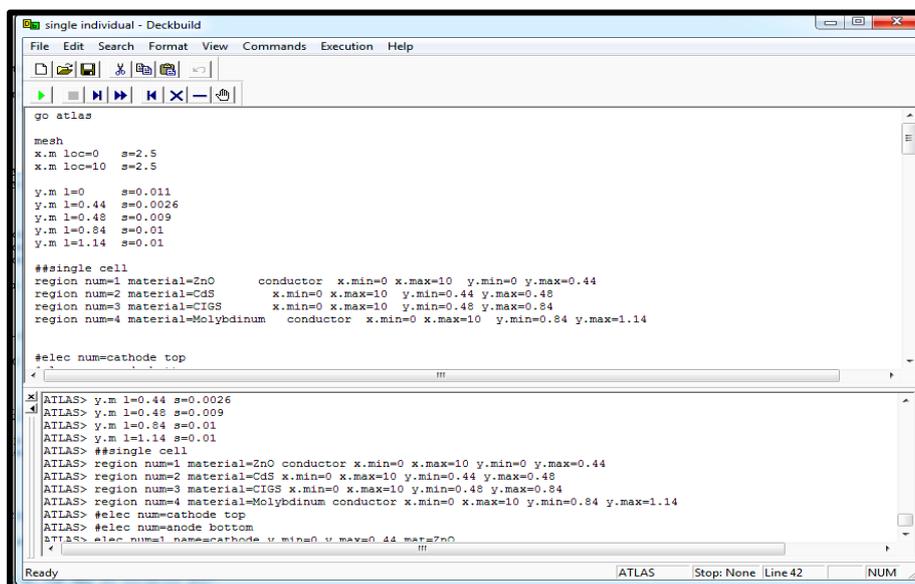


Figure IV.2: Editeur DECKBUILD du Logiciel TCAD-SILVACO.

La fenêtre inférieure de DECKBUILD est l'exécution de programme et les informations extraites et les résultats sont répertoriés à mesure que le programme s'exécute. L'exécution / les résultats sont affichés comme indiqué dans la Figure IV.3.

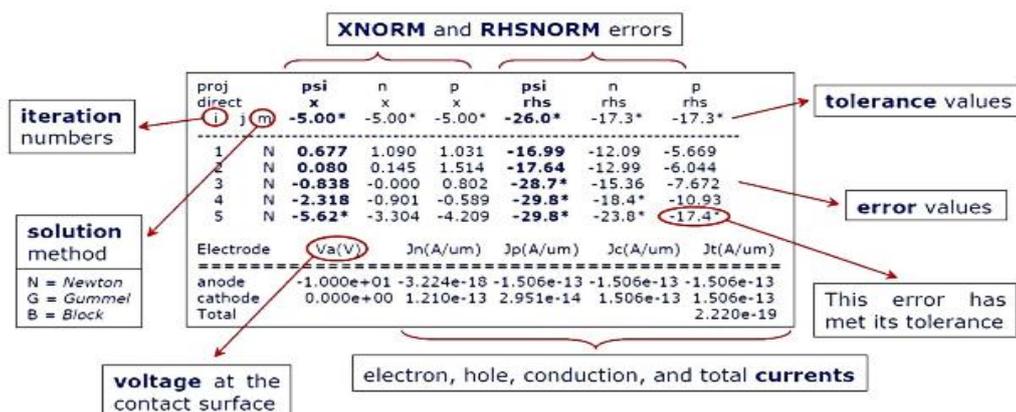


Figure IV.3: Fenêtre d'information (l'exécution, les résultats)

DEVEDIT est un éditeur graphique qui permet de construire ou modifier la structure d'un dispositif. TONYPLOT est un outil qui permet de visualiser en 2D ou 3D les structures réalisées ainsi que leurs comportements électriques, optiques et électroniques. Il permet aussi de tracer

différentes courbes des résultats, comme la courbe J(V) ou EQE, et d'appliquer certaines opérations sur ces courbes. Dans ce travail nous avons utilisé le simulateur de dispositif ATLAS qui permet de prévoir les comportements électriques et optiques des cellules solaires.

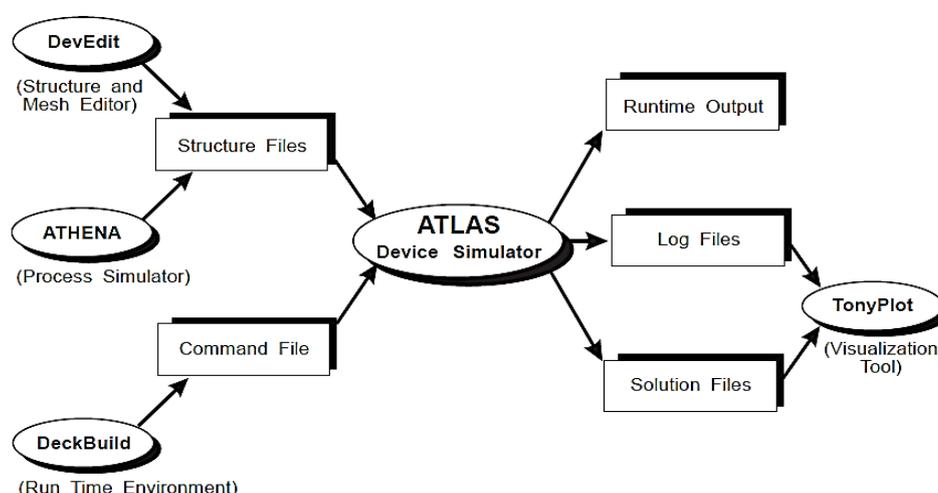
### IV.3.1. Simulateur ATLAS

L'outil de simulation ATLAS est un simulateur de modélisation de composants électroniques, il est capable de prédire les caractéristiques électriques de la plupart des composants semi-conducteurs en régime (DC), (AC), transitoire ou fréquentiel. En plus du comportement électrique "externe", il fournit des informations sur la distribution interne de variables telles que les concentrations des porteurs, les lignes de courant, le champ électrique ou le potentiel, et des données importantes pour la conception et l'optimisation des procédés technologiques. Ceci est réalisé en résolvant numériquement l'équation de Poisson et les équations de continuité des électrons et des trous en deux dimensions en un nombre fini de points formant le maillage de la structure définie par l'utilisateur ou par le programme [24].

Ce simulateur est composé de deux parties :

- Une partie traitement numérique (méthode d'intégration, de discrétisation...),
- Une partie formée des modèles physiques des composants semi-conducteurs les plus récents : Modèles de recombinaisons, d'ionisation par impact, de mobilités en fonction de la température, statistiques de Fermi-Dirac et de Boltzmann notamment.

Le schéma de la Figure IV.4 représente les différents types d'informations qui circulent en entrée et en sortie d'ATLAS pendant la simulation. Le deuxième type de fichier est le fichier « log » qui stocke toutes les valeurs de tensions et des courants provenant de l'analyse du dispositif simulé (c'est le fichier du comportement électrique).



**Figure IV.4: Types d'informations de l'entrée et de la sortie du simulateur ATLAS [24].**

Le troisième fichier de sortie est le « Fichier de solution », ce fichier stocke les données concernant les valeurs des variables solutions en un point donné du dispositif (c'est le fichier physique, il contient la structure dans un état particulier). Les deux derniers fichiers sont traités par l'outil de visualisation « TonyPlot ».

### IV.3.2. Logique de programmation

Après la présentation de l'outil de simulation ATLAS, sa composition interne et son fonctionnement, nous allons maintenant présenter l'ordre des commandes propres à la logique de programmation dans ce simulateur.

Groupe		Commandes
1. Spécification de la structure	—————	MESH REGION ELECTRODE DOPING
2. Spécification des modèles des matériaux	—————	MATERIAL MODELS CONTACT INTERFACE
3. Sélection de la méthode	—————	METHOD
4. Spécification des solutions	—————	LOG SOLVE LOAD SAVE
5. Analyse des résultats	—————	EXTRACT TONYPLOT

**Figure IV.5: Ordre des groupes de commandes fondamentales dans le logiciel ATLAS [24].**

#### IV.3.2.1. Spécification de la Structure étudiée

La spécification de la structure est effectuée en définissant le maillage, les régions, les électrodes et le niveau de dopage. ATLAS reçoit les fichiers d'entrée qui contiennent les programmes de simulation de DeckBuilt.

ATLAS est appelé à exécuter ces derniers par la commande suivante : go atlas

Le format des commandes d'ATLAS est le suivant [24]:

<STATEMENT> <PARAMETER> = <VALUE>

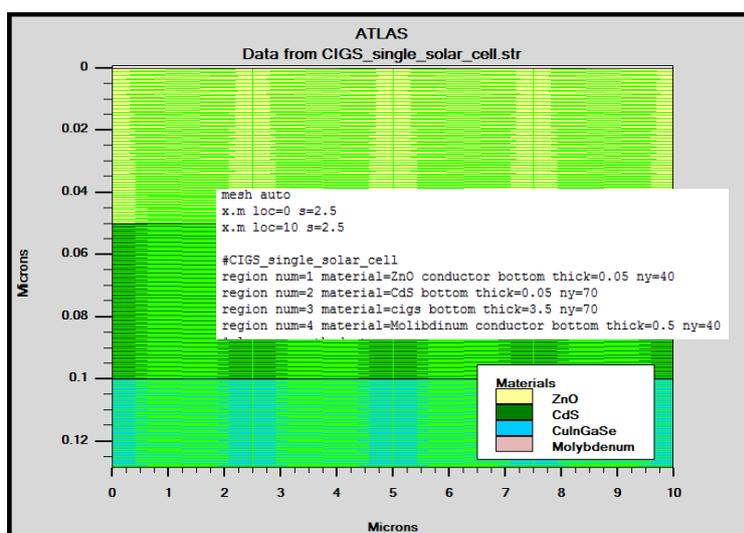
### a. Spécification de Maillage (*mesh*)

Le maillage est une série de lignes horizontales et verticales. Dans notre étude, le maillage utilisé est à deux dimensions. Par conséquent, seuls les paramètres x et y sont définis. La Figure (IV.6) montre le maillage de notre structure de la cellule solaire à base de CIGS.

Le format général de définition de maillage est:

*x.mesh location*=<value> *spacing*=<value>

*y.mesh location*=<value> *spacing*=<value>



**Figure IV.6: Maillage à deux dimensions de la cellule solaire à base de CIGS**

Le maillage joue un rôle important pour l'obtention de bons résultats de simulations, Le choix de maillage doit être fait de façon à avoir un compromis entre la vitesse d'exécution et l'exactitude des résultats tel qu'un maillage épais produit une rapide simulation, mais les résultats sont moins précis, tandis qu'un maillage fin produit un ralentissement de la simulation, mais des résultats plus précis. Alors le maillage fin est plus intéressant de point de vue de l'obtention de bons résultats simulés.

### b. Spécification des Régions et Matériaux

Le format de définition des régions est le suivant:

REGION number=<integer> <material type> <position parameters>

La Figure (IV.7), montre la façon de définition des matériaux pour chaque région de notre structure de la cellule solaire à base de CIGS.

Notons que le code de couleur indique la matière. Les régions ont des lignes verticales et horizontales pour marquer leurs limites. Cette figure représente des régions contenues dans la structure de la cellule à base de CIGS.

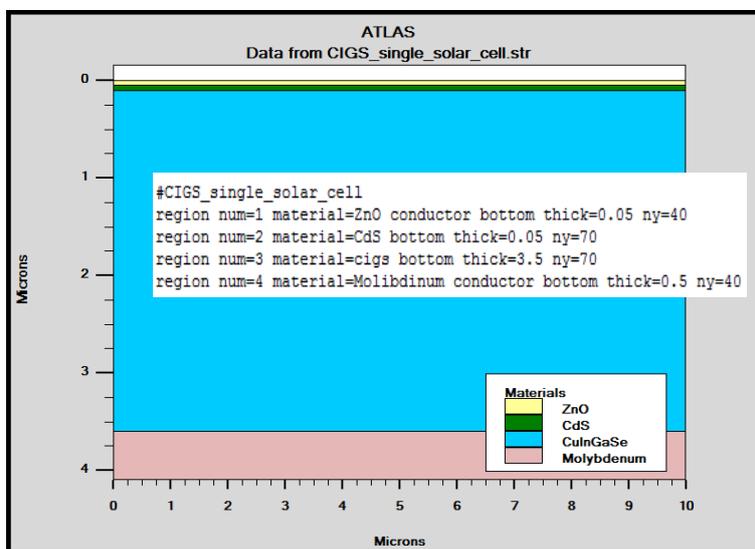


Figure IV.7: Définition des régions et des matériaux de la cellule solaire à base de CIGS.

### c. Spécification des électrodes

Le format de définition d'électrodes est comme suit:

ELECTRODE NAME=<electrode name> <position parameters>

Les positions des électrodes sont localisées par les instructions suivantes :

*X.MIN* : Spécifie le point de départ de l'électrode.

*RIGHT* : la position de l'électrode se situe à la droite de la structure (inverse : LEFT).

*TOP* : la position de l'électrode est en haut de la structure (inverse : BOTTOM)[24].

La Figure (IV.8) montre la position de l'anode et la cathode par des valeurs attribuées à y de notre structure de la cellule solaire à base CIGS.

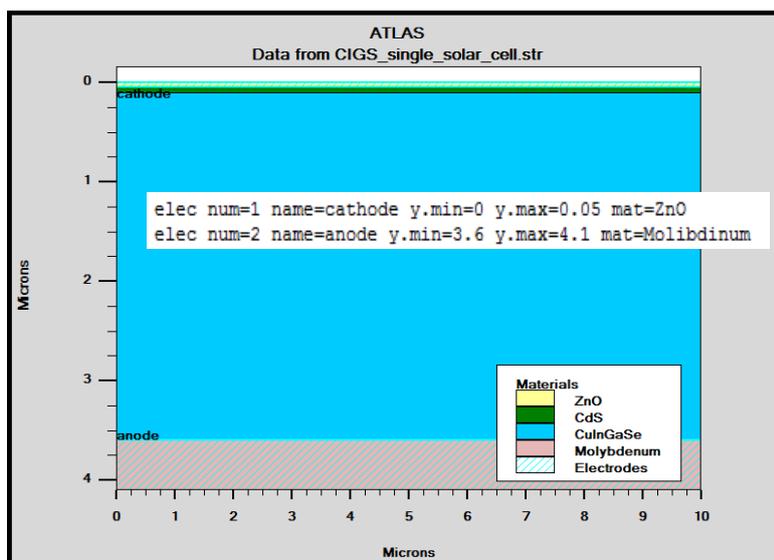


Figure IV.8: Définition des électrodes de la cellule solaire à base de CIGS.

#### d. Spécification de Dopage

Le dernier aspect de la spécification de la structure qui doit être défini est le dopage. Le format de la déclaration de dopage dans « Atlas » se présente comme suit[24]:

DOPING <distribution type> <dopant type> <position parameters>

Dans la figure (IV.9), les types de dopage et les niveaux de dopage sont définis.

Le dopage peut être de type N ou P. Le type de distribution peut être uniforme ou Gaussienne.

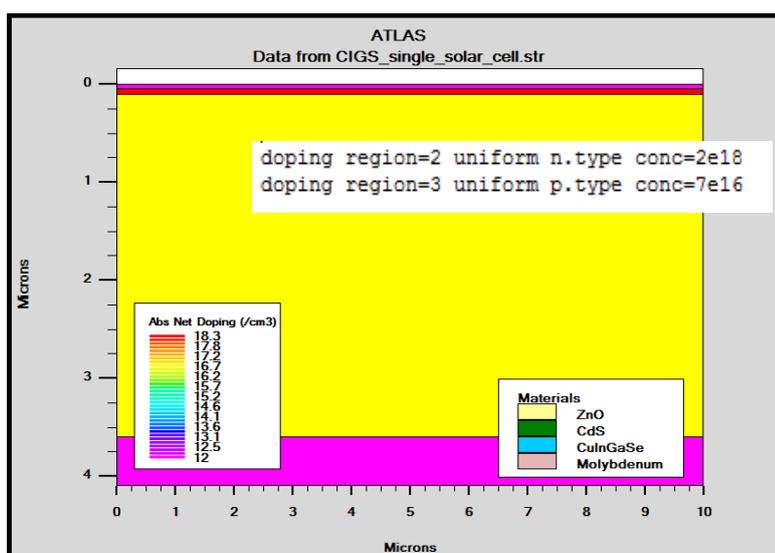


Figure IV.9: Définition de dopage de la cellule solaire à base de CIGS.

### IV.3.2.2. Spécifications des Matériaux et des modèles

Après avoir défini la spécification de la structure, l'étape prochaine est la spécification des modèles des matériaux qui est divisé en : matériau, modèles, contact et interface.

#### a. Spécifications des Matériaux

Tous les matériaux sont divisés en trois classes: semi-conducteurs, isolants et conducteurs. Chaque classe nécessite un ensemble des différents paramètres à spécifier. Pour les semi-conducteurs, ces propriétés comprennent l'affinité électronique, la bande interdite, la densité d'états et la vitesse de saturation[24].

L'instruction MATERIAL permet de spécifier les propres valeurs pour ces paramètres de base. Ces valeurs peuvent s'appliquer à un matériau spécifié ou à une région spécifiée[24]. Le format d'Atlas pour définir le matériau est le suivant :

*Matériau* < localisation > < matériau définition >

Plusieurs autres paramètres peuvent être définis par la déclaration matériel, comme exemples de ces paramètres : la mobilité d'électrons (MUN) et la mobilité de trous (MUP), (TAUN0) et (TAUP0) qui sont les durées de vie d'électrons et de trous respectivement.

La déclaration de notre matériau(CIGS) est comme suit :

*material region = 3 EG300 = 1.16 PERMITTIVITY = 13.6 AFFINITY = 4.8 MUN = 100 MUP = 25 NC300 = 2.2e18 NV300 = 1.8e19 taup0 = 1e-7 taun0 = 1e-7*

#### b. Spécifications des modèles

Les modèles physiques dans les semi-conducteurs ont été modélisés sous la forme d'expressions mathématiques reliant le potentiel électrostatique et la densité des porteurs.

Les modèles physiques sont classés en cinq catégories[24]:

- mobilités des porteurs de charges
- mécanismes de génération-recombinaison
- les statistiques de transport
- l'ionisation par impact
- l'effet tunnel

La syntaxe de la commande Model est la suivante:

MODELS <model flag> <general parameter> <model dependent parameters>

Le choix du modèle dépend des matériaux choisis pour la simulation. L'exemple ci-dessous active plusieurs modèles.

MODELS CONMOB FLDMOB SRH

CONMOB est le modèle de la mobilité dépendante de la concentration du dopage. FLDMOB est le modèle de dépendance de la mobilité du champ électrique. SRH est le modèle de recombinaison Shockley-Read-Hall.

### c. Beam

La lumière est modélisée dans ATLAS par la déclaration :

*BEAM <parameters>*

L'origine du faisceau lumineux est défini par ces paramètres X.ORIGIN et Y.ORIGIN, le paramètre ANGLE spécifie la direction de propagation du faisceau relativement à l'axe x tandis que ANGLE=90 décrit que l'illumination est verticale à partir de la surface supérieure de la cellule solaire. La déclaration de la commande « Beam » dans la programme de notre simulation est comme suit :

*beam num=1 x.origin=5 y.origin=-1 angle=90 power.file=solarex10.spec verbose reflects=1 front.refl back.refl quantum.eff=1.*

### d. Contact

Le contact détermine les attributions des électrodes. La syntaxe du contact est la suivante:

*contact name = < name >*

Ce qui suit est un exemple de la commande contact de notre programme:

*contact name=anode SURF.REC VSURFN=1e5 VSURFP=1e5*

*contact name=cathode SURF.REC VSURFN=1e5 VSURFP=1e5*

### e. Interface

Indique les paramètres d'interface aux frontières des semi-conducteurs /isolants. Tous les paramètres s'appliquent seulement aux nœuds de frontière là où ils sont indiqués. L'exemple suivant définit Interface avec des vitesses de recombinaison en surface  $S_n$  et  $S_p$  pour les électrons et les trous respectivement:

*INTERFACE X.MIN=-4 X.MAX=4 Y.MIN=-0.5 Y.MAX=4 S.N=1E4 S.P=1E4*

### IV.3.2.3. Spécification des méthodes numériques de calcul

Il existe plusieurs méthodes numériques pour calculer des solutions aux problèmes du dispositif à semi-conducteur. Trois types de techniques de solution sont utilisés dans SILVACO-ATLAS :

- Méthode de GUMMEL
- Méthode de NEWTON
- Méthode des blocs

Pour la méthode de GUMMEL, elle est utilisée pour la résolution des équations à une seule inconnue et des variables fixées constantes, la résolution se fait d'une manière itérative jusqu'à la solution est achevée. La deuxième méthode de NEWTON est la méthode la plus répandue dans le simulateur ATLAS, elle est utilisée pour résoudre des systèmes d'équations à plusieurs inconnues. La troisième méthode est une combinaison des deux premières méthodes, elle est utile pour les systèmes d'équation mixtes[24]. L'exemple suivant illustre l'utilisation de la déclaration de méthode :

*METHOD NEWTON*

Dans cet exemple, les équations sont résolues par la méthode NEWTON.

### IV.3.2.4. Spécification de Solution

La spécification des solutions est faite par les instructions suivantes :

Log, Solve, Load et Save.

#### a. Log

L'instruction Log est utilisée pour enregistrer toutes les caractéristiques terminales dans un fichier de données. Toute donnée de type DC, transitoire, ou AC générée par la commande Solve après une commande Log est enregistrée.

L'exemple suivant montre un exemple d'utilisation de l'instruction Log.

*Log outfile = myoutputfile.log*

L'exemple montre l'enregistrement de données dans le fichier (myoutputfile.log).

#### b. Solve

L'instruction Solve suit l'instruction Log. Elle cherche une solution pour un ou plusieurs points de polarisation. Ce qui suit est un exemple de l'instruction Solve.

*Solve V2 = 0.8*

*Solve V2 = 0.9*

### **c. Load et Save**

L'instruction Load introduit, à partir d'un fichier existant, pour chaque point de polarisation les solutions précédentes en tant que proposition initiale.

L'instruction Save permet l'enregistrement de toutes les informations obtenues pour un nœud dans un fichier de sortie.

### **IV.3.2.5. Analyse des résultats**

#### **a. Extract et Tonyplot**

La commande Extract est utilisée pour extraire des valeurs de paramètres bien précis du fichier log ou du fichier solution[24]. La déclaration de cette commande comme suite :

```
EXTRACT INIT INF = "<nom de fichier>"
```

La commande Tonyplot permet à ATLAS de sauvegarder automatiquement un fichier de structure et de le tracer dans la fenêtre TonyPlot. Dans l'exemple ci-dessous, l'instruction Extract permet d'obtenir la caractéristique courant-tension d'une cellule solaire. Ces informations sont enregistrées dans le fichier "IV Characteristic CIGS single solar cell.log". Ensuite, TonyPlot trace le graphe reliant les informations contenues dans ce fichier. La figure (IV.10) montre le résultat d'une courbe obtenue par l'instruction TonyPlot. Cet exemple montre aussi comment les paramètres photovoltaïques ( $J_{cc}$ ,  $V_{co}$ ,  $FF$  et  $\eta$ ) d'une cellule solaire sont calculés par ce programme.

```
extract init infile="IV Characteristic CIGS single solar cell.log"
extract name="Jsc" y.val from curve(v."anode", i."anode") where x.val=0.0
extract name="JscmAc2" $Jsc*1e03
extract name="i" curve(v."anode", i."cathode"*1e03) outfile="donne.dat"
extract name="Voc" x.val from curve(v."anode", i."anode") where y.val=0.0
extract name="Pm" min(curve(v."anode", (v."anode" * i."anode ")))
extract name="Vm" x.val from curve(v."anode", (v."anode"*i."anode " ))|
where y.val=$"Pm"
extract name="Im" $"Pm"/$"Vm"
extract name="FF" ($"Pm"/($"Jsc"*$"Voc"))*100
extract name="Eff" (-$Pm/(0.1))*100
tonyplot IV Characteristic CIGS single solar cell.log.
```

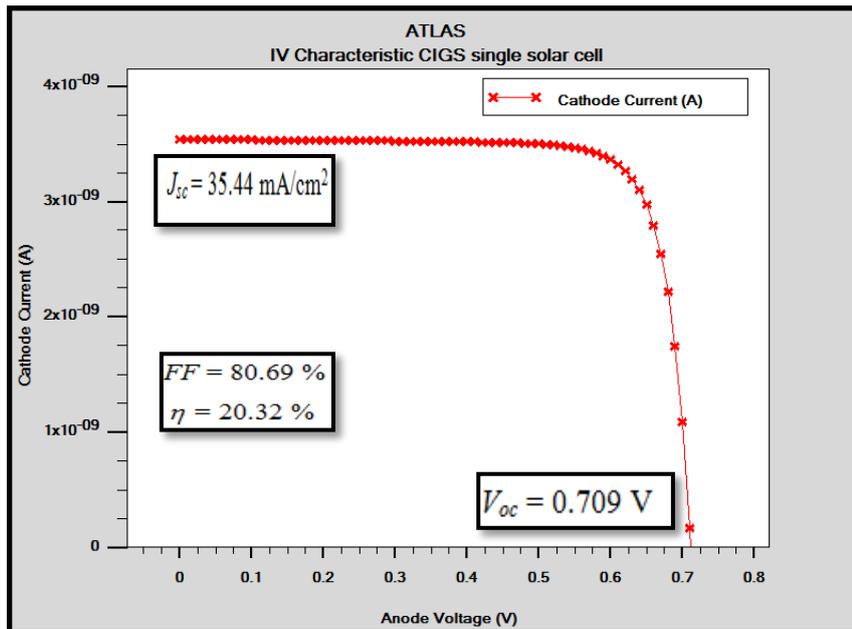


Figure IV.10: Courbe I(V) d'une cellule solaire à base de CIGS obtenue dans Tonyplot du logiciel ATLAS.

#### IV.4. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié les modèles physiques pour simuler une cellule solaire. La modélisation est effectuée avec le logiciel de simulation par éléments finis ATLAS de la compagnie TCAD-SILVACO. Nous avons présenté le logiciel de simulation TCAD-SILVACO, son mode de fonctionnement et son module de simulation ATLAS utilisé pour la simulation du comportement électrique des composants électroniques. Nous avons aussi donné les différentes commandes (instructions) dans ATLAS et les différents modèles existants dans ce simulateur. Nous avons ensuite présenté les résultats de simulation de la structure de la cellule solaire CIGS par le simulateur ATLAS.

**Chapitre V: Résultats de simulation numérique et  
interprétation**

## V.1. Introduction

Dans ce chapitre nous allons présenter les résultats de la simulation numérique par le logiciel Atlas des cellules solaires simple jonction CGS, CIGS et tandem en CGS/CIGS et l'interprétation des résultats trouvés. Nous commençons ce chapitre par la définition de la structure de la cellule solaire simple, les modèles physiques et les paramètres des matériaux employés dans la simulation numérique. Après cela, nous allons présenter les résultats de la simulation électrique de cette structure et la comparaison entre les résultats obtenus avec ceux trouvés expérimentalement. Ensuite, nous allons étudier la performance d'une cellule solaire tandem (CGS/CIGS) à double jonction avec une cellule supérieure CGS et une cellule inférieure CIGS. Nous allons aussi étudier par simulation, l'influence de l'épaisseur de la couche supérieure en CGS sur les paramètres photovoltaïques ( $J_{cc}$ ,  $V_{co}$ ,  $FF$ ,  $\eta$ ) de la cellule solaire tandem. Enfin, nous allons étudier l'effet de la température sur les caractéristiques de la cellule solaire tandem optimisée dans l'intervalle de température 300-400 K.

## V.2. Description de la structure de la cellule solaire tandem en CGS/CIGS

Pour obtenir à un rendement de conversion élevé, il faut utiliser des absorbeurs différents avec des bandes d'énergie interdites différents pour maximiser l'absorption de la lumière. La structure de la cellule solaire tandem en CGS/CIGS est représentée dans la Figure V.1.

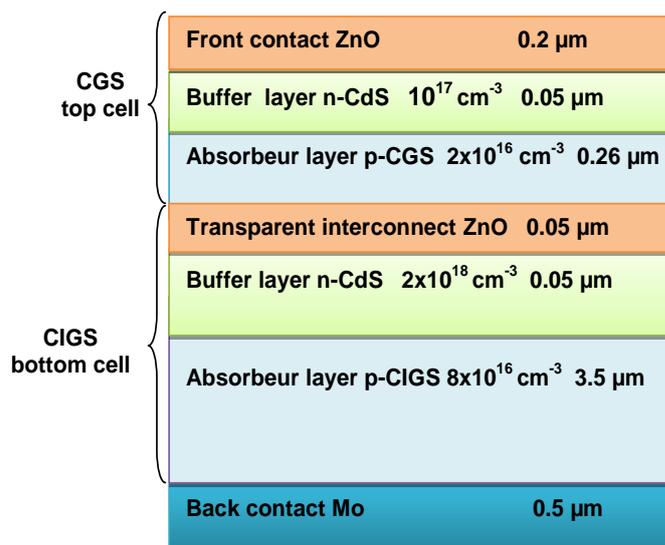


Figure V.1: Schéma de la structure de la cellule solaire tandem simulée, avec la cellule supérieure en CGS et la cellule inférieure en CIGS connectées par l'oxyde conducteur transparent en ZnO.

Cette structure simulée se compose de deux cellules solaires: la cellule supérieure CGS à large bande interdite ( $E_g = 1.69 \text{ eV}$ ) ayant une petite épaisseur réglable et la cellule inférieure CIGS à petite bande interdite ( $E_g = 1.16 \text{ eV}$ ) avec une épaisseur optimale  $3.5 \mu\text{m}$  [3]. Cette conception est destinée à la conversion d'une large gamme de photons incidents sur la cellule solaire et à générer une puissance électrique maximale. La conception détaillée de la cellule solaire tandem se compose d'une hétérojonction supérieure n-CdS/p-CGS et d'une hétérojonction inférieure n-CdS/p-CIGS, qui sont connectées optiquement et électriquement par une couche ZnO servant de d'oxyde conducteur transparent (TCO). La cellule tandem est soumise à un éclairage par le spectre solaire AM 1.5 de densité de puissance  $100 \text{ mW/cm}^2$ . On a supposé que le rayonnement solaire est normalement incident sur la couche ZnO qui représente le contact cathodique en avant. Le contact anode en arrière est représenté par une couche de molybdène (Mo). Les concentrations de dopage et les différentes épaisseurs utilisées dans la simulation sont indiquées dans la Figure (V.1).

### **V.3. Modèles physiques**

Le simulateur 2D SILVACO-ATLAS a été utilisé pour la simulation numérique des cellules solaires en CGS et en CIGS. Ce dernier consiste en un ensemble d'équations fondamentales : l'équation de Poisson, les équations de continuité et les équations de transport. L'équation de Poisson concerne les variations du potentiel électrostatique aux densités de charge locales. Les équations de continuité et de transport décrivent la façon dont les densités d'électrons et de trous évoluent à la suite de processus de génération, de recombinaison et de transport.

Les modèles que nous avons utilisés dans notre simulation sont comme suit [84]:

- Le modèle de recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH).

Nous avons considéré le modèle de recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH) pour les défauts dans le simulateur ATLAS, ce dernier est utilisé pour calculer les taux de recombinaison des porteurs qui dépend de la densité des états situés dans la bande interdite, la position de l'énergie de défaut et les section de capture pour l'électron ( $\sigma_n$ ) et le trou ( $\sigma_p$ ) . Pour les conditions d'équilibre, les taux de recombinaison nets des électrons ( $R_n$ ) et des trous ( $R_p$ ) sont identiques. Le taux de recombinaison de SRH en présence d'états défectueux dans le semiconducteur est donné par [24]:

$$\begin{aligned}
 R_{n,p} = & \int_{E_v}^{E_c} \frac{\sigma_{nA} \sigma_{pA} (np - n_i^2) g_{GA}(E)}{\sigma_{nA} \left( n + n_i \exp \left[ \frac{E - E_i}{k_B T} \right] \right) + \sigma_{pA} \left( p + n_i \exp \left[ \frac{E_i - E}{k_B T} \right] \right)} dE + \\
 & \int_{E_v}^{E_c} \frac{\sigma_{nD} \sigma_{pD} (np - n_i^2) g_{GD}(E)}{\sigma_{nD} \left( n + n_i \exp \left[ \frac{E - E_i}{k_B T} \right] \right) + \sigma_{pD} \left( p + n_i \exp \left[ \frac{E_i - E}{k_B T} \right] \right)} dE
 \end{aligned} \tag{V.1}$$

Où  $n$  et  $p$  sont les concentrations d'électrons et de trous,  $n_i$  est la concentration de porteurs intrinsèque,  $E_i$  est le niveau de Fermi pour le matériau intrinsèque (non dopé),  $k$  est la constante de Boltzmann et  $T$  est la température.

Les sections de capture d'électron (trou)  $\sigma_n$  et  $\sigma_p$  peuvent varier entre  $10^{-17}$  et  $10^{-12} \text{cm}^2$  [85] et ont été choisies pour notre simulation égales à  $2 \times 10^{-15} \text{cm}^2$  pour  $\sigma_n$  dans les couches de CGS et CIGS et  $3 \times 10^{-13} \text{cm}^2$  pour  $\sigma_n$  des matériaux CGS et CIGS. Pour le matériau CdS,  $\sigma_n/\sigma_p = 10^{-15} \text{cm}^2/10^{-17} \text{cm}^2$  ont été sélectionnées.

➤ Le modèle de recombinaison d'états d'interface et des contacts :

La recombinaison par les défauts présents aux hétéro-interfaces (CdS/CGS, CdS/CIGS) et aux contacts avant et arrière sont modélisées par l'inclusion des vitesses de recombinaison de surface des électrons ( $S_n$ ) et des trous ( $S_p$ ) choisies comme étant égales à  $10^5 \text{m/s}$ .

➤ Le modèle de densité de défauts :

Toutes les couches sont polycristallines et donc contiennent un grand nombre de défauts[86], nous avons considéré deux distributions de défauts de formes gaussiennes pour les états donneurs des couches CGS et CIGS et les états accepteurs de la couche CdS. Les distributions de défauts des accepteurs et des donneurs sont données par [24], [87]:

$$g_{GA}(E) = N_{GA} \exp \left( - \left( \frac{E_{GA} - E}{W_{GA}} \right)^2 \right) \tag{V.2}$$

$$g_{GD}(E) = N_{GD} \exp \left( - \left( \frac{E - E_{GD}}{W_{GD}} \right)^2 \right) \tag{V.3}$$

Où  $E$  est l'énergie des défauts, les indices ( $G, A, D$ ) signifient les états de défaut gaussien, accepteur et donneur, respectivement. La densité des états se caractérise par la densité effective des états  $N_{GA}$  ou  $N_{GD}$ , l'écart d'énergie standard  $W_{GA}$  ou  $W_{GD}$ , l'énergie du pic de la forme

gaussienne,  $E_{GA}$  ou  $E_{GD}$ . La position des états de défaut recombinant réside dans une distribution étroite proche du milieu de bande d'énergie [85], [88].

➤ Le modèle de gap d'énergie :

Le gap d'énergie varie avec la température et les résultats expérimentaux montrent que les bandes d'énergie de la plupart du semi-conducteur diminuent avec augmentation de la température[89]. La variation de bande interdite avec la température est modélisée dans Atlas par une fonction universelle[24] :

$$E_g(T) = E_g(0) - \left( \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \right) = E_g(300) + \alpha \left[ \frac{300^2}{300 + \beta} - \frac{T^2}{T + \beta} \right] \quad \text{V. 4}$$

Où  $E_g(0)$  est l'énergie du gap à 0 K,  $\alpha$  et  $\beta$  sont des constantes. Dans le cas du  $\text{CuInSe}_2$ ,  $E_g(0) = 1.04$  eV et  $\alpha$  et  $\beta$  sont respectivement égaux à  $3.6 \times 10^{-4}$  ( $\text{eV} \cdot \text{K}^{-1}$ ) et 350 K [34].

En général,  $dE_g/dT$  est de l'ordre de  $-2 \times 10^{-4}$  ( $\text{eV} \cdot \text{K}^{-1}$ )[90].  $E_g(300)$  de CIGS et CGS sont respectivement 1.16 et 1.68 eV.

Après la détermination des modèles physiques vient l'étape de la définition de la méthode numérique de résolution et le calcul des paramètres de la cellule solaire. Nous avons choisi la méthode de Newton pour la résolution des équations de transport des semi-conducteurs liant le potentiel électrostatique et les densités de porteurs de charges ensemble. A chaque itération, le système des équations est résolu ensemble. La simulation électrique de la cellule solaire démarre par une polarisation nulle sur toutes les électrodes (état de l'équilibre thermodynamique). Une fois la solution de l'état de l'équilibre thermodynamique est trouvée, elle est utilisée pour l'initialisation de la simulation à l'état éclairée et polarisé. Les solutions obtenues sont tracées soit par une interface graphique (TONYPLOT) d'Atlas ou par extraction des résultats.

#### **V.4. Paramètres de la simulation**

Le simulateur ATLAS- SILVACO nécessite l'entrée des paramètres de chaque matériau dans la structure de la cellule solaire (tableaux (V.1-V.3))[85].

<b>Paramètres des matériaux</b>	<b>CdS</b>	<b>CGS/CIGS</b>
bande interdite $E_g$ (eV)	2.4	1.69/1.16
affinité électronique $\chi_e$ (eV)	4.5	4.8
permittivité relative $\epsilon_r$ ( $F.cm^{-1}$ )	10	13.6
Mobilité d'électron $\mu_n$ ( $cm^2/V.s$ )	100	100
Mobilité de trou $\mu_p$ ( $cm^2/V.s$ )	25	25
Densité effective d'états des électrons $N_c$ ( $cm^{-3}$ )	$2.2 \times 10^{18}$	$2.2 \times 10^{18}$
Densité effective d'états des trous $N_v$ ( $cm^{-3}$ )	$1.8 \times 10^{19}$	$1.8 \times 10^{19}$

**Tableau V.1: Paramètres de matériaux utilisés dans la simulation.**

<b>Densité de défauts</b>		
densité des états accepteurs (donneurs) de formes gaussiennes $N_{GA}, N_{GD}$ ( $cm^{-3}$ )	$10^{15}$ (A)	$10^{15}$ (D)
L'énergie du pic de la gaussienne $E_{GA}, E_{GD}$ (eV)	1.2 (A)	0.84/0.58(D)
Largeur de la distribution $W_{GA}, W_{GD}$ (eV)	0.1(A)	0.1(D)
section de capture d'électron $\sigma_n$ ( $cm^2$ )	$10^{-15}$	$2 \times 10^{-15}$
section de capture de trou $\sigma_p$ ( $cm^2$ )	$10^{-17}$	$3 \times 10^{-13}$

**Tableau V.2: Paramètres de la simulation des densités d'états de défauts et sections de capture d'électrons (trous).**

<b>vitesses de recombinaison des électrons (<math>S_n</math>) et trous (<math>S_p</math>) (<math>cm.s^{-1}</math>)</b>		
L'interface CdS/CIGS	$10^5$	$10^5$
L'interface CdS/CGS	$10^5$	$10^5$
Contact avant	$10^5$	$10^5$
Contact arrière	$10^5$	$10^5$

**Tableau V.3: Paramètres de la simulation des vitesses de recombinaison en surface des électrons ( $S_n$ ) et des trous ( $S_p$ ).**

Les cellules solaires basées sur l'absorbeur  $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$  sont particulièrement intéressantes car les paramètres de la cellule peuvent être modifiés en modifiant la composition ( $x$ ) du matériau absorbeur.  $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$  est un matériau à gap direct, la fonction du rapport de composition :  $x = \text{Ga}/(\text{In} + \text{Ga})$ . Il a été établi qu'en fonction de  $x$ , l'énergie de la bande interdite  $E_g$  peut être déterminé à partir de la relation (I.7) donnée dans le chapitre I.

Les mobilités des électrons ( $\mu_n$ ) et trous ( $\mu_p$ ) de chaque couche ont été définies selon [92],[86]. L'affinité électronique du matériau  $\text{CuInGaSe}_2$  est dans la gamme de  $4.10 - 4.90 \text{ eV}$  [11] et la valeur  $4.8 \text{ eV}$  a été choisie pour la présente simulation. Les densités des états effectives de la bande de conduction et de valence  $N_c$  et  $N_v$  ont été définies selon [93] pour chaque couche.

Les paramètres optiques des parties réelles et imaginaires de l'indice de réfraction dépendant de la longueur d'onde  $n(\lambda)$  et du coefficient d'extinction  $k(\lambda)$  pour les matériaux CGS et CIGS sont obtenus à partir de [36] et ceux pour les matériaux ZnO et CdS sont reportés dans [94], [95]. Pour le matériau du contact métallique Mo, ses constantes optiques sont disponibles dans la base de données SOPRA du simulateur SILVACO-ATLAS et utilisées dans la présente simulation. La perte de la lumière par réflexion de la surface de la cellule tandem a également été intégrée dans le modèle. Dans cette étude, la température de fonctionnement des cellules solaires a été fixée à  $300 \text{ K}$ .

## **V.5. Résultats de la simulation de la cellule solaire en CIGS, CGS et en CGS/CIGS**

Les cellules solaires en CIGS et CGS sont d'abord simulées séparément en utilisant les paramètres de simulation présentés dans les tableaux (V.1-V.3).

La construction de ces structures dans le simulateur ATLAS consiste en quatre étapes [24] : définitions du maillage, des régions, des électrodes et du dopage.

### **V.5.1. Modélisation de la cellule solaire inférieure en CIGS dans ATLAS**

La cellule solaire en CIGS à étudier possède une structure p-n à hétérojonctions, la couche tampon en CdS de type (n) et la couche absorbeur en CIGS de type (p) avec deux électrodes l'anode en molybdène (Mo) et la cathode en ZnO.

- Première étape : nous avons défini le maillage (mesh) de la structure, Le maillage divise la structure à simuler en petites cellules pour permettre la résolution numérique des équations fondamentales des semi-conducteurs (équations de continuité et de Poisson

pour les électrons et pour les trous) afin de trouver la distribution des porteurs de charges, du potentiel électrique et du courant. Le maillage doit être le plus fin possible pour l'obtention de bons résultats de simulation. Dans notre travail, nous avons utilisé le maillage représenté sur la figure (V.2).

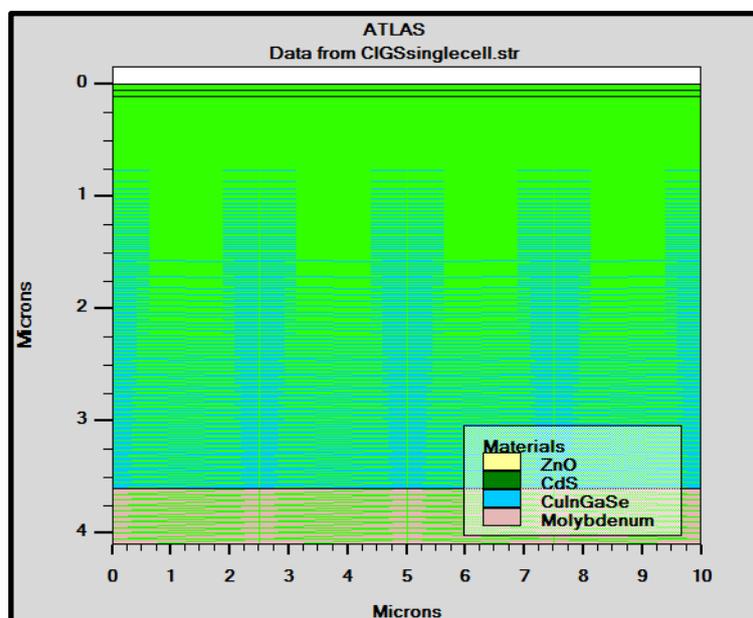


Figure V.2: Maillage de la structure de la cellule solaire en CIGS

- Deuxième étape : Après l'opération du maillage, vient l'étape de définition des régions. Ces dernières déterminent les différentes couches formant la cellule solaire. Nous avons utilisé des régions rectangulaires tout en définissant le matériau de chacune d'elles. La couche de type  $n$  est en CdS et la couche de type  $p$  est en CIGS.
- Troisième étape : Une fois les régions et les matériaux spécifiés viennent l'étape de la définition des électrodes. La cathode en ZnO est située sur la couche en CdS et l'anode en molybdène (Mo) est réalisée sur toute la surface inférieure de la couche en CIGS de la cellule solaire.
- Quatrième étape : nous avons défini le type de dopage et sa concentration, la couche en CdS de type  $n$  et la couche en CIGS de type  $p$  sont dopées uniformément avec des concentrations montrées dans la figure (V.1).

La figure (V.3) représente la structure simulée de la cellule solaire en CdS/CIGS.

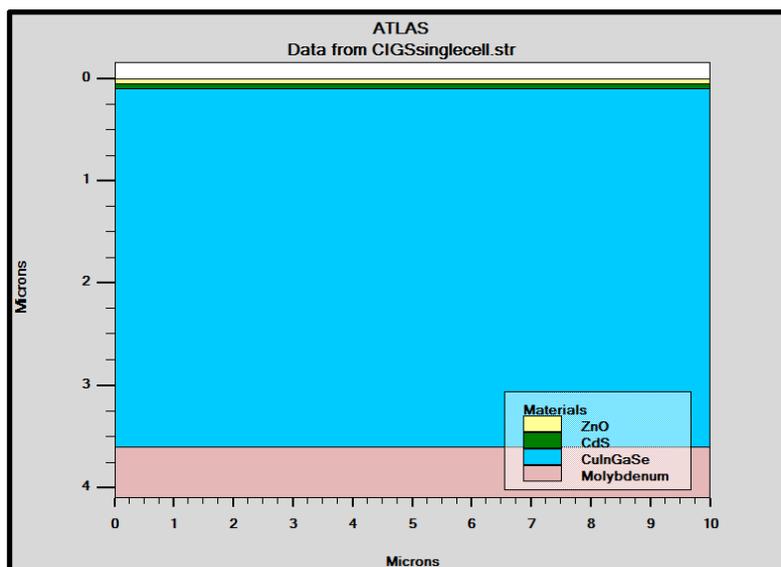


Figure V.3: Structure bidimensionnelle d'une cellule solaire seule à base de CIGS.

#### V.5.1.1. Cellule solaire à base de CIGS réalisée expérimentalement

La structure de la cellule solaire CIGS simulée est similaire à celle réalisée expérimentalement dans [3]. La figure (V.4) montre les courbes I-V et les paramètres électriques des cellules solaires de structures ZnO/CdS (type n)/CIGS (type p)/Mo de record mondial avec des rendements de 20.1 % et 20.3%.

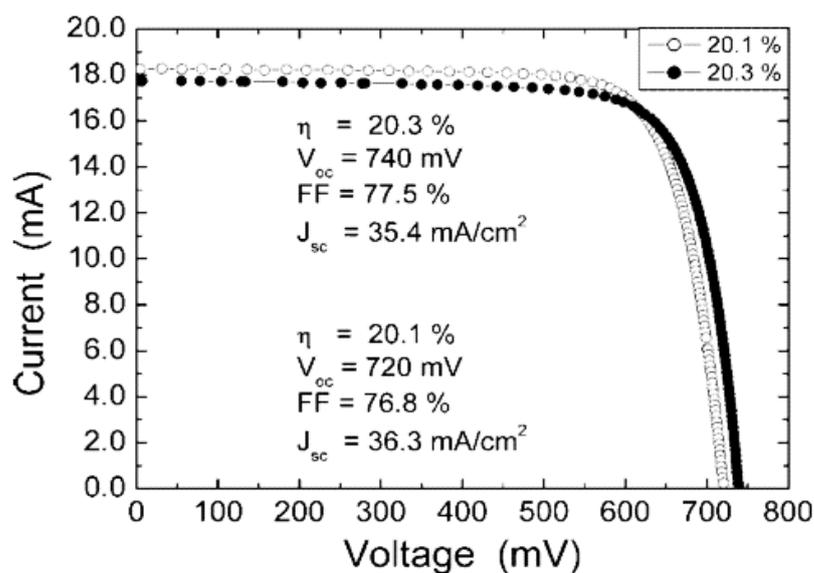


Figure V.4: Courbe I-V de cellules certifiées de record mondial (par Fraunhofer ISE le 15 avril et 30 juin 2010) d'efficacité 20.1% (surface de la cellule ( $0.5028 \pm 0.0015$ )  $\text{cm}^2$ ) et 20.3% (surface de la cellule ( $0.5015 \pm 0.0063$ )  $\text{cm}^2$ ) [3].

La configuration de la cellule a été décrite comme suit : verre sodocalcique (3 mm), couche pulvérisée de molybdène (500 – 900 nm), couche CIGS (2.5 – 3.5  $\mu\text{m}$ ), couche tampon déposée de CdS (40 – 50 nm), une couche de ZnO non dopée (50 à 100 nm), une couche de ZnO dopée à l'aluminium (150 – 200 nm). La Cellule solaire CIGS avec une efficacité de 20.3% a été élaborée avec une composition variable ( $Ga/(Ga + In)$ ) de 0.30 à 0.35 [3].

### V.5.1.2. Simulation de la cellule solaire en CIGS

La caractéristique électrique (J-V) de la cellule solaire inférieure à base de CIGS sous éclairement par le spectre solaire AM 1.5 de densité de puissance 100 mW/cm<sup>2</sup> est représentée sur la figure (V.5).

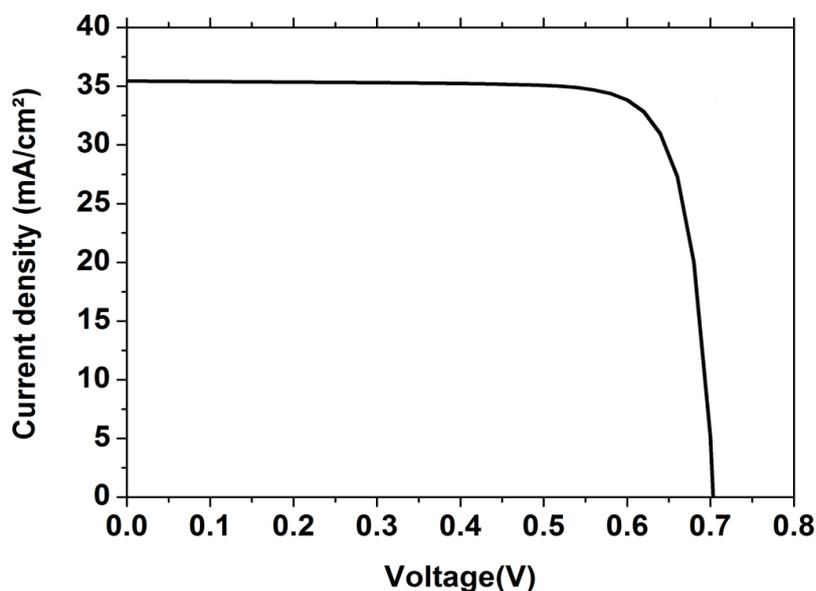


Figure V.5: Caractéristique J(V) de la cellule solaire inférieure en CIGS.

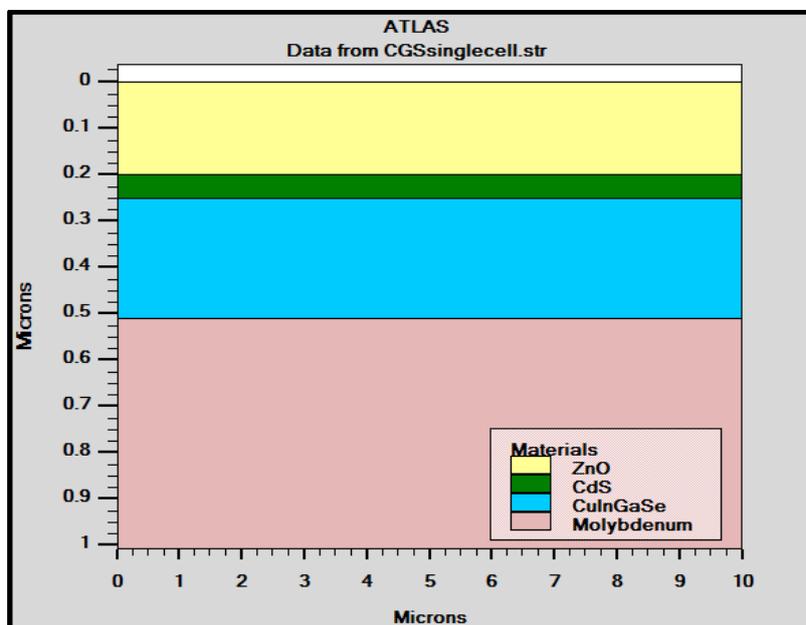
Les paramètres photovoltaïques de la cellule inférieure CIGS simple jonction sont extraits de la caractéristique (J-V) et sont donnés dans le tableau (IV.4) avec d'autres résultats de simulation et expérimentaux pour la comparaison avec nos résultats de simulation. On remarque que les résultats de la simulation du rendement de conversion  $\eta$  de 20.32%, sont en accord avec les résultats expérimentalement existants dans la littérature[3] et sont meilleurs que ceux obtenus par simulation d'une cellule solaire CIGS avec un couche tampon CdS d'épaisseur (50 nm) et une couche absorbante CIGS d'épaisseur (3.5  $\mu\text{m}$ ) en utilisant le simulateur SCAPS[96].

Paramètres / Résultats	$J_{cc} (mA/cm^2)$	$V_{co} (V)$	$FF (%)$	$\eta (%)$
Résultats de simulation de notre travail	35.44	0.709	80.69	20.32
Résultats de simulation[96]	33.5	0.67	80	17.5
Résultats Expérimentaux[3]	35.4	0.74	77.5	20.3

**Tableau V.4: Résultats de simulation et expérimentale pour une cellule solaire simple à base de CIGS.**

### V.5.2. Caractéristique électrique de la cellule solaire supérieure en CGS

La structure de cellule solaire en CGS se compose d'un absorbeur CGS de type p, une couche tampon CdS de type n, une couche TCO provenant du matériau ZnO déposée en dessus de la cellule jouant le rôle du contact avant (cathode) et une couche Mo servant comme contact arrière (anode). Dans la Figure (V.6) est montrée cette structure de cellule CGS. La composition de Ga  $x = 1$  correspond à une bande interdite d'énergie 1.69 eV. Les concentrations de dopage CdS et CGS ont été optimisées pour améliorer le rendement de conversion de la cellule en CGS.



**Figure V.6: Structure bidimensionnelle d'une cellule solaire supérieure à base de CIGS.**

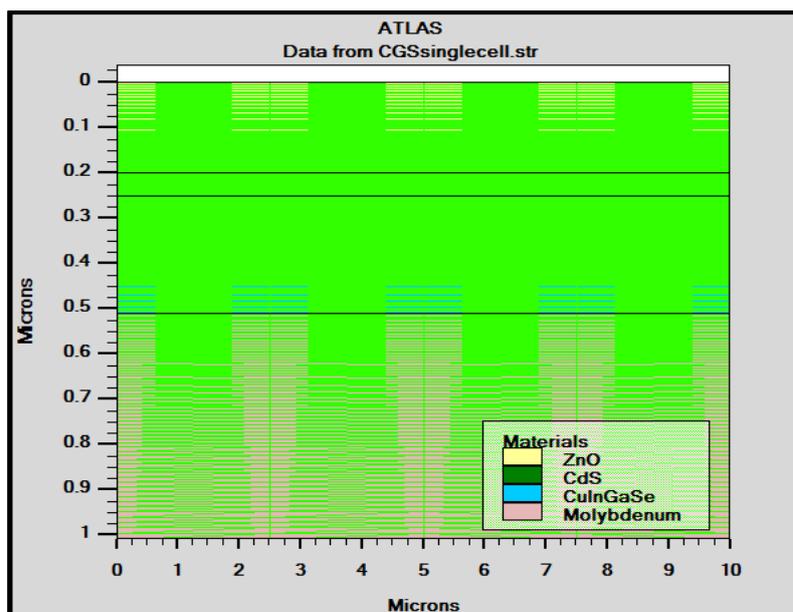


Figure V.7: Maillage de la structure de la cellule solaire supérieure en CGS.

La caractéristique électrique  $J(V)$  d'une cellule solaire supérieure à base de CGS sous éclairage par le spectre solaire  $AM\ 1.5$  de densité de puissance  $100\ mW/cm^2$  est représentée sur la figure (V.8).

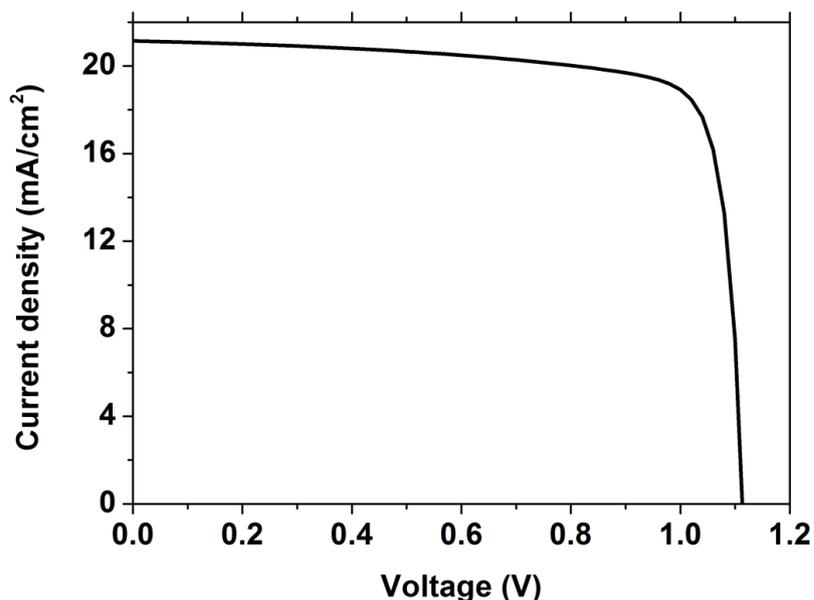


Figure V.8: Caractéristique  $J(V)$  de la cellule solaire supérieure en CGS.

Les paramètres photovoltaïques pour la cellule supérieure CGS sont groupés dans le tableau (V.5). Les résultats de la simulation montrent que  $V_{co}$  et  $FF$  sont raisonnables, mais la

densité de courant  $J_{cc}$  est faible. Le résultat du rendement  $\eta = 18.92\%$  est inférieur à celui de la cellule CIGS ceci est principalement dû à la diminution de  $J_{cc}$ .

Paramètres	$J_{cc}(mA/cm^2)$	$V_{co} (V)$	$FF (%)$	$\eta (%)$
Cellule simulée CGS	21.13	1.11	80.42	18.92

**Tableau V.5: Les paramètres et caractéristiques d'une cellule solaire supérieure en CGS.**

### V.5.3. Caractéristique électrique de la cellule solaire tandem en CGS/CIGS

La structure de la cellule solaire tandem en CGS/CIGS est Montrée dans la Figure (V.1). Les cellules supérieure en CGS et inférieure en CIGS sont connectées optiquement et électriquement avec une couche d'oxyde conducteur transparent de ZnO. Pour modéliser la couche d'interconnexion transparente ZnO dans la cellule tandem, une approche est utilisée et consiste à ajouter une électrode qui recouvre exactement la couche d'interconnexion transparente ZnO et y attacher une résistance localisée en utilisant la déclaration dans ATLAS [24] "contact name=com resist= $10^{16}$ ". En faisant cela, nous forçons le courant à passer de l'anode à la cathode et empêcher tout courant de circuler dans l'électrode supplémentaire. Physiquement, cela peut être justifié par le fait que la couche d'interconnexion agit comme une résistance permettant de faire circuler le courant sans limitation significative. La valeur de la résistance peut être utilisée pour ajuster la quantité de courant permettant de circuler à travers l'électrode supplémentaire, ce qui permet de contrôler la résistance de la couche intermédiaire.

La figure (V.9) représente la structure simulée de la cellule solaire tandem en CGS/CIGS et le maillage de cette structure dans la figure (V.10).

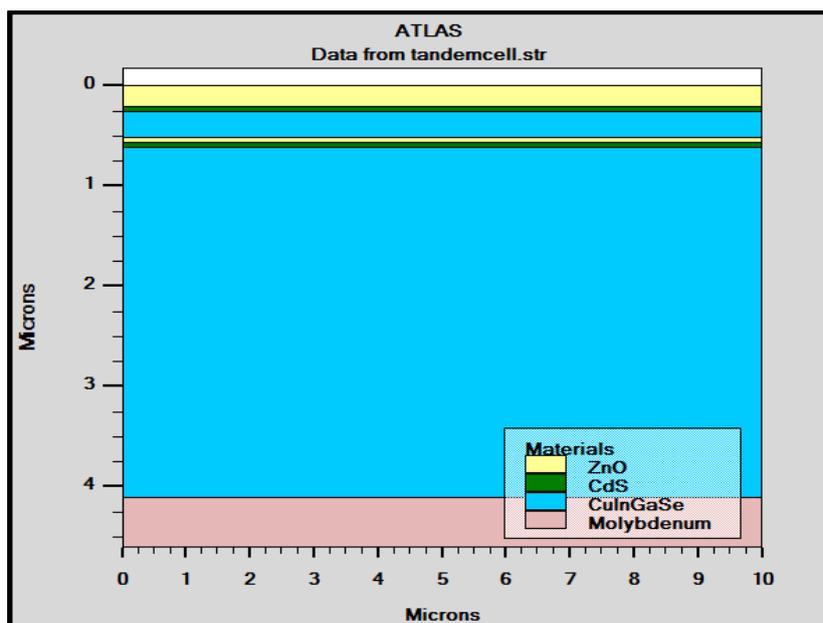


Figure V.9: Structure bidimensionnelle d'une cellule solaire tandem en CGS/CIGS

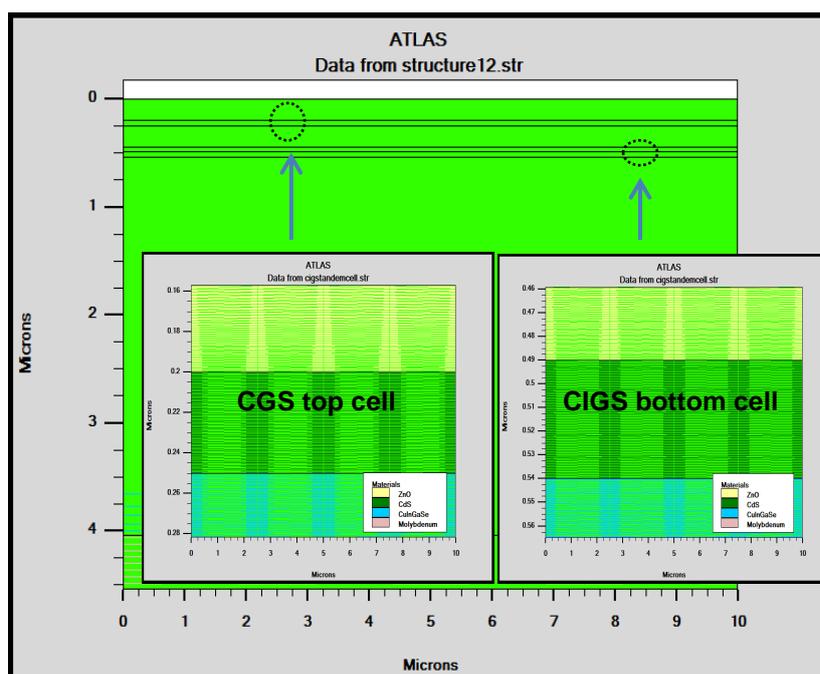
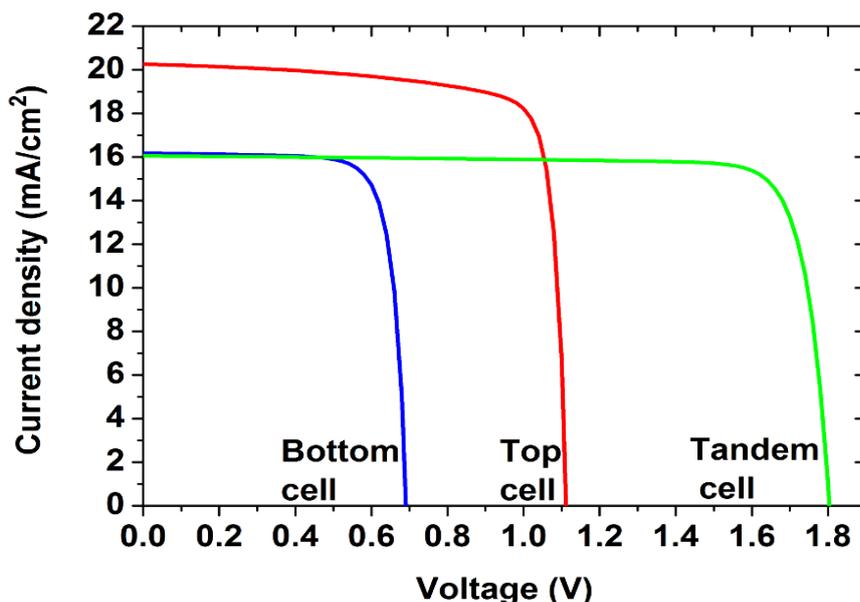


Figure V.10: Maillage de la structure de la cellule solaire tandem en CGS/CIGS.

La caractéristique électrique (J-V) de la cellule solaire tandem CGS/CIGS avant optimisation, sous éclaircment par le spectre solaire *AM 1.5* de densité de puissance  $100 \text{ mW/cm}^2$  est représentée sur la figure (V.11).



**Figure V.11: Caractéristiques (J-V) pour la cellule tandem en CGS/CIGS, la cellule inférieure en CIGS et la cellule supérieure en CGS.**

Les paramètres photovoltaïques déduits de ces caractéristiques sont indiqués dans le tableau (V.6).

Pour obtenir les courbes ( $J$ - $V$ ) des cellules supérieure et inférieure, les contacts anode et cathode de la cellule supérieure en CGS ont respectivement été placés à la couche d'interconnexion ZnO et à la couche supérieure de ZnO, alors que les contacts anode et cathode de la cellule inférieure CIGS étaient respectivement placés à la couche Mo arrière et à la couche d'interconnexion ZnO. La  $J_{cc}$  de la cellule solaire tandem est limitée par le faible courant de la cellule inférieure en CIGS, la valeur de  $J_{cc}$  en tandem de  $16.35 \text{ mA/cm}^2$  est à peu près égal à la valeur  $J_{cc}$  de la cellule inférieure de  $16.17 \text{ mA/cm}^2$ . Tandis que, la valeur de  $V_{co}$  de la cellule tandem ( $1.8 \text{ V}$ ) est exactement égal à la somme des valeurs de  $V_{cot}$  de la cellule supérieure ( $1.11 \text{ V}$ ) et celle de la cellule inférieure ( $0.69 \text{ V}$ ). À partir de ces résultats, le bon fonctionnement des cellules CGS et CIGS connectées en série formant la cellule solaire tandem est démontré. En outre, le facteur de forme  $FF$  de la cellule tandem ( $85.09\%$ ) est supérieure à celui de la cellule supérieure ( $80,94\%$ ) et celui de la cellule inférieure ( $79.05\%$ ). Evidemment, l'augmentation de  $V_{co}$  et  $FF$  de la cellule tandem est due à l'amélioration de rendement à  $25.11\%$  par rapport à ceux des cellules en CIGS ( $20.32\%$ ) et en CGS ( $18.92\%$ ). Il y'a peu d'études de simulation sur les cellules solaires tandem basées sur des cellules en CGS et en CIGS sont rapportées dans la littérature. La performance de la cellule tandem en CGS/CIGS avec une

cellule inférieure en CIGS à double bande interdite graduelle et pour différentes épaisseurs de l'absorbeur CGS a été étudiée numériquement en utilisant le logiciel AMPS-1D, son rendement de conversion atteint a été de 25%[13]. L'optimisation des épaisseurs des couches et du rapport Ga pour une cellule solaire tandem en CGS/CIGS utilisant le logiciel SILVACO-ATLAS permet d'atteindre un rendement de conversion optimal de 24% [32]. Dans le présent travail, le rendement simulé de 25.11% obtenu pour la cellule tandem en CGS/CIGS non optimisée est meilleur que celui rapporté dans [13], [32].

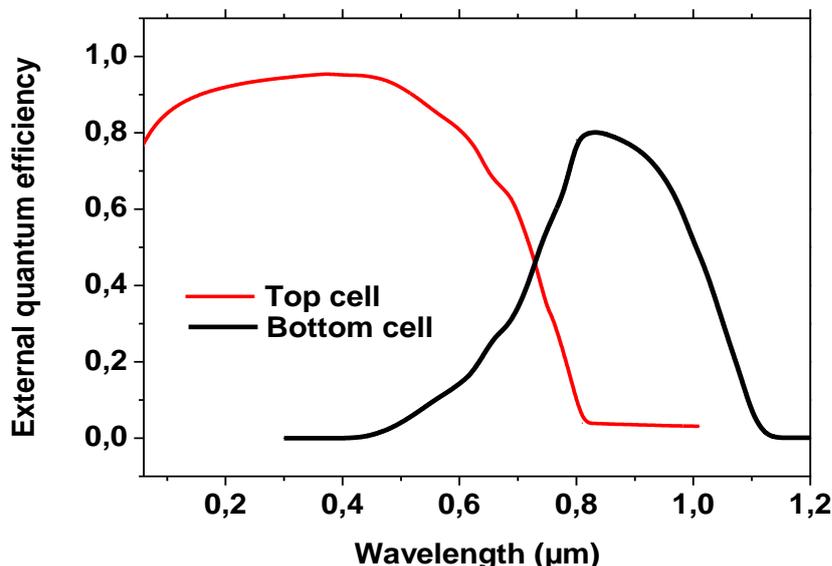
En comparant les résultats de la cellule solaire simple en CIGS avec la cellule inférieure en CIGS dans la cellule solaire tandem, nous observons que les paramètres photovoltaïques de la cellule inférieure en CIGS sont considérablement dégradés en raison des couches supérieures absorbant certaines quantités de la lumière incidente. Les résultats de la cellule supérieure en CGS dans la cellule tandem par rapport à la cellule solaire individuelle CGS, montrent plutôt de petites diminutions des paramètres photovoltaïques en raison de l'absorption de la lumière par les couches inférieures. La densité de courant  $J_{cc}$  de la cellule solaire tandem est limité par la faible densité de courant  $J_{ccb}$  de la cellule inférieure CIGS simplement parce que le critère d'égalité du courant de court-circuit entre les cellules supérieure en (CGS) et inférieure en (CIGS) n'est pas satisfait ("current mismatching"), ce qui entraîne un rendement de conversion de la cellule tandem relativement faible.

Type de cellule/ paramètres	$J_{cc} (mA/cm^2)$	$V_{co} (V)$	$FF (%)$	$\eta (%)$
cellule individuelle en CGS	21.13	1.11	80.42	18.92
cellule individuelle en CIGS	35.44	0.709	80.69	20.32
cellule supérieure en CGS	20.26	1.11	80.94	18.22
Cellule inferieure en CIGS	16.17	0.69	79.05	8.83
Cellule tandem en CGS/CIGS	16.35	1.8	85.09	25.11

**Tableau V.6: Paramètres photovoltaïques des cellules solaires (supérieure, inferieure et tandem).**

Les courbes du rendement quantique externe (EQE) par rapport à la longueur d'onde pour les cellules supérieures et inférieures dans la cellule solaire tandem sont représentées sur la Figure (V.12). Nous avons simulé EQE en mode court-circuit. La cellule supérieure à un

maximum en EQE autour de  $0.38 \mu\text{m}$ , tandis que la cellule inférieure montre un maximum en EQE à  $0.83 \mu\text{m}$ .



**Figure V.12: Rendement quantique externe (EQE) de la cellule solaire tandem en fonction de la longueur d'onde.**

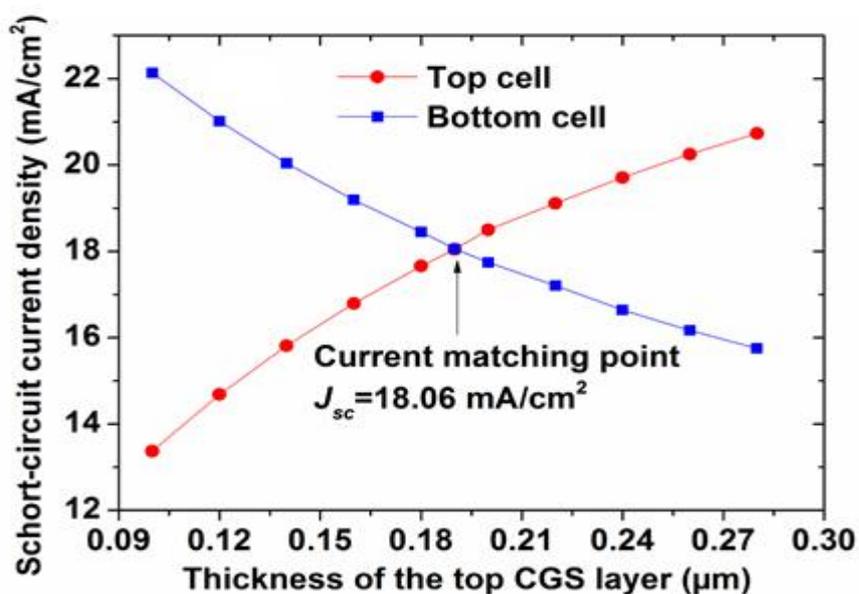
Les courtes longueurs d'onde inférieures à  $0.7 \mu\text{m}$  sont principalement absorbées par la cellule supérieure alors que l'intervalle de longueurs d'onde compris entre  $0.78$  et  $1.1 \mu\text{m}$  sont absorbées par la cellule inférieure.

#### V.5.4. Effet de l'épaisseur de couche en CGS de la cellule supérieure sur les paramètres photovoltaïques de la cellule tandem

Avant de diminuer l'épaisseur de la couche CGS, la densité de courant de court-circuit de la cellule inférieure  $J_{ccb}$  est inférieure à la densité de courant de court-circuit  $J_{cct}$  de la cellule supérieure, l'épaisseur de la cellule supérieure peut être réduite pour assurer le critère d'égalité du courant de court-circuit entre les cellules inférieure et supérieure où  $J_{ccb} = J_{cct}$ . Étant donné que la densité de courant de la cellule tandem  $J_{cc}$  est limitée par la plus faible valeur des densités de courant  $J_{ccb}$  et  $J_{cct}$ . Par conséquent, la densité de courant de court-circuit de la cellule tandem  $J_{cc}$  et le rendement de la cellule sera maximal lorsque l'épaisseur de la cellule supérieure diminue pour atteindre cette condition ( $J_{ccb} = J_{cct}$ ).

Pour assurer le critère d'égalité du courant de court-circuit entre la cellule supérieure en CGS et la cellule inférieure en CIGS, on fait varier l'épaisseur de la couche CGS de la cellule supérieure entre  $0.1 \mu\text{m}$  et  $0.28 \mu\text{m}$  dans la cellule tandem en CGS/CIGS tout en maintenant l'épaisseur de la cellule inférieure en CIGS fixée à  $3.5 \mu\text{m}$ .

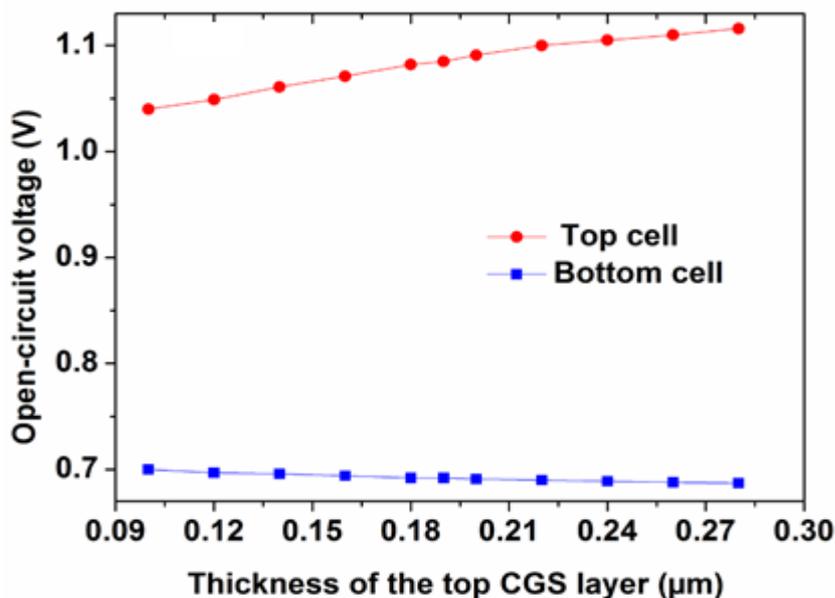
La structure de la cellule solaire tandem est montrée sur la figure (V.1) et les paramètres de simulation sont indiqués dans les tableaux (V.1-V.3). Dans la figure (V.13) sont tracées les densités de courant de court-circuit des cellules supérieure et inférieure en fonction de l'épaisseur de la couche CGS. Quand l'épaisseur de la couche CGS dans la cellule supérieure augmente, la  $J_{cct}$  de la cellule supérieure augmente et la  $J_{ccb}$  de la cellule inférieure diminue. C'est simplement parce que la cellule supérieure absorbe plus de lumière, laissant passer moins de lumière à la cellule inférieure et en revanche, si la cellule supérieure absorbe moins de lumière, laissant transmettre plus de lumière à la cellule inférieure. Avec l'augmentation progressive de la couche CGS dans la cellule supérieure, la  $J_{cct}$  croissant et la  $J_{ccb}$  décroissant se croisent à une épaisseur CGS optimale de  $0.19 \mu\text{m}$  où le critère d'égalité du courant de court-circuit entre les cellules inférieure et supérieure ( $J_{cct} = J_{ccb} = 18.06 \text{ mA/cm}^2$ ) est réalisé.



**Figure V.13:** Densités de courant de court-circuit des cellules supérieure en CGS et inférieure en CIGS en fonction de l'épaisseur de la couche supérieure en CGS dans la cellule tandem en CGS/CIGS.

Dans la figure (V.14), nous avons représenté les tensions du circuit ouvert des cellules supérieure et inférieure en fonction de l'épaisseur de la couche supérieure en CGS. Nous

remarquons que la  $V_{co}$  de la cellule supérieure augmente avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche CGS. Plus l'épaisseur de cette couche augmente, plus de photons ayant des longueurs d'onde plus longues peuvent être collectées dans la couche absorbante[97]. Par la suite, ceci contribuera à plus de génération de paires d'électron-trou et par conséquent une augmentation de la tension en circuit ouvert. Cependant, la  $V_{cob}$  de la cellule inférieure est presque indépendante de la variation de l'épaisseur de la couche CGS.



**Figure V.14: Tensions en circuit ouvert de cellule supérieure en CGS et inférieure en CIGS en fonction de l'épaisseur de la couche supérieure en CGS dans la cellule solaire tandem en CGS/CIGS.**

Dans l'étape suivante sont tracés les paramètres photovoltaïques simulés de la cellule tandem en fonction de l'épaisseur de la couche CGS. La densité de courant de court-circuit  $J_{cc}$  dans la Figure (V.15) montre une augmentation de  $13.48 \text{ mA/cm}^2$  à  $18.06 \text{ mA/cm}^2$  avec une augmentation de l'épaisseur de CGS de  $0.1$  à  $0.19 \mu\text{m}$ . L'augmentation  $J_{cc}$  est attribuée à absorption de la lumière dans la cellule supérieure. Par conséquent, pour la gamme inférieure de l'épaisseur de la couche CGS comprise entre  $0.1 \mu\text{m}$  et  $0.19 \mu\text{m}$ , la cellule tandem  $J_{cc}$  est contrôlée par la densité de courant de la cellule supérieure  $J_{sct}$  comme montré dans la Figure (V.13). Avec une augmentation de l'épaisseur de CGS comprise entre  $0.19$  et  $0.28 \mu\text{m}$ , la  $J_{cc}$  de la cellule tandem diminue de  $18.06 \text{ mA/cm}^2$  à  $15.93 \text{ mA/cm}^2$ . Ainsi, la  $J_{cc}$  de la cellule tandem est contrôlée par la densité de courant de la cellule inférieure  $J_{ccb}$  comme montré dans la Figure (V.13). La  $J_{cc}$  la cellule tandem atteint un maximum de  $18.06 \text{ mA/cm}^2$  pour l'épaisseur de la

couche CGS optimale  $0.19 \mu m$ , correspondante à la condition d'égalité du courant de court-circuit entre les cellules inférieure et supérieure ("current matching")  $J_{cc} = J_{cct} = J_{ccb} = 18.06 mA/cm^2$  est vérifié.

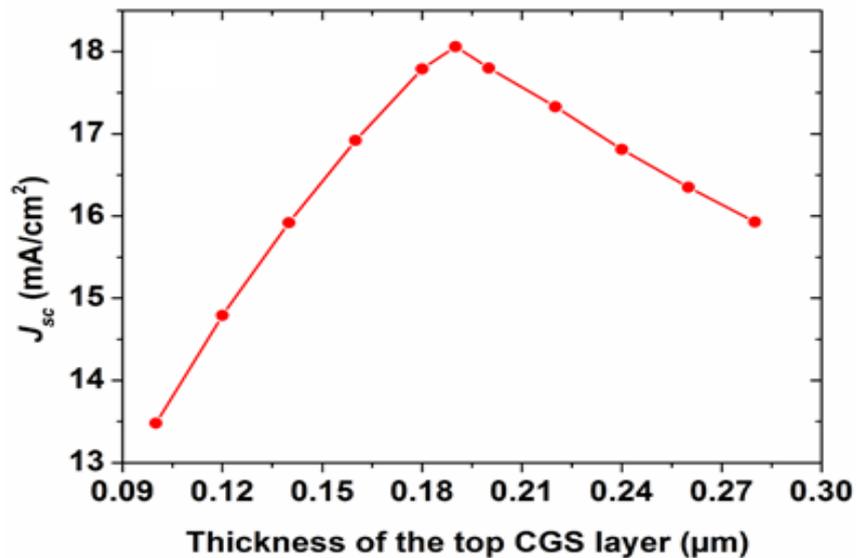


Figure V.15: La densité de courant de court-circuit  $J_{cc}$  de la cellule solaire tandem en CGS/CIGS en fonction de l'épaisseur de la couche en CGS.

Dans la Figure (V.16) nous avons représenté la variation de  $V_{co}$  de la cellule tandem avec l'épaisseur de la couche CGS.

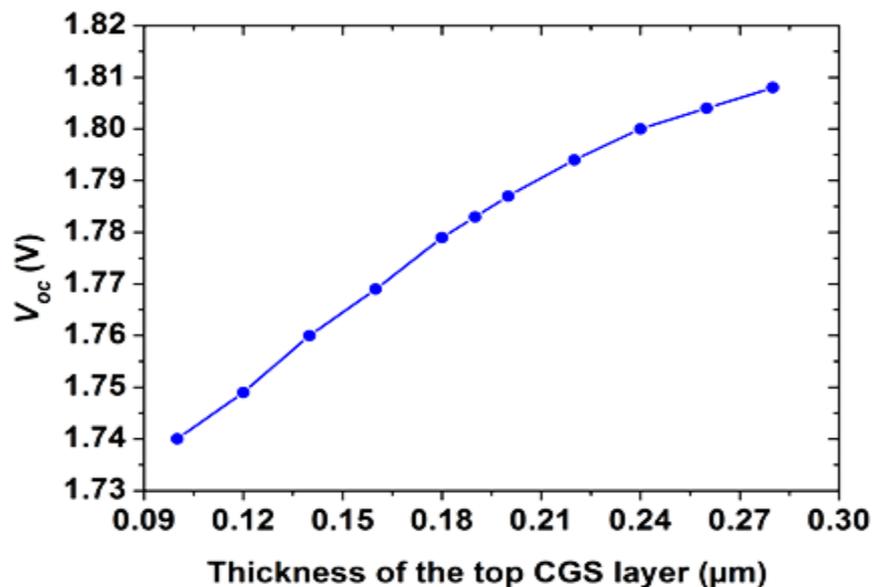


Figure V.16: La tension en circuit ouvert  $V_{co}$  de la cellule solaire tandem en CGS/CIGS en fonction de l'épaisseur de la couche en CGS.

Nous observons que la tension de circuit ouvert augmente avec l'augmentation de l'épaisseur du CGS. Dans le cas d'une cellule tandem, la tension de circuit ouvert est la somme des tensions de circuit ouvert des cellules inférieure et supérieure. Les valeurs  $V_{cot}$  de la cellule supérieure sont supérieures à celles de la cellule inférieure, comme illustré dans la Figure (V.14) Ainsi, l'augmentation  $V_{cot}$  de la cellule supérieure avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche CGS conduit à l'augmentation de  $V_{co}$  de la cellule tandem. Cependant, les tensions de circuit ouvert des cellules supérieures et tandem présentent des tendances similaires avec l'épaisseur de la couche CGS.

Dans la Figure (V.17), nous avons représenté l'influence de l'épaisseur du CGS sur le la facteur de forme  $FF$  de la cellule tandem, à l'inverse de la variation de  $J_{cc}$ , le  $FF$  présente un minimum de 81.44 % à l'épaisseur du CGS optimale 0.19  $\mu m$ . Il commence à diminuer de 86.65% pour l'épaisseur du CGS de 0.1  $\mu m$  puis augmente de 81.44% pour atteindre 85.42% à 0.28  $\mu m$ .

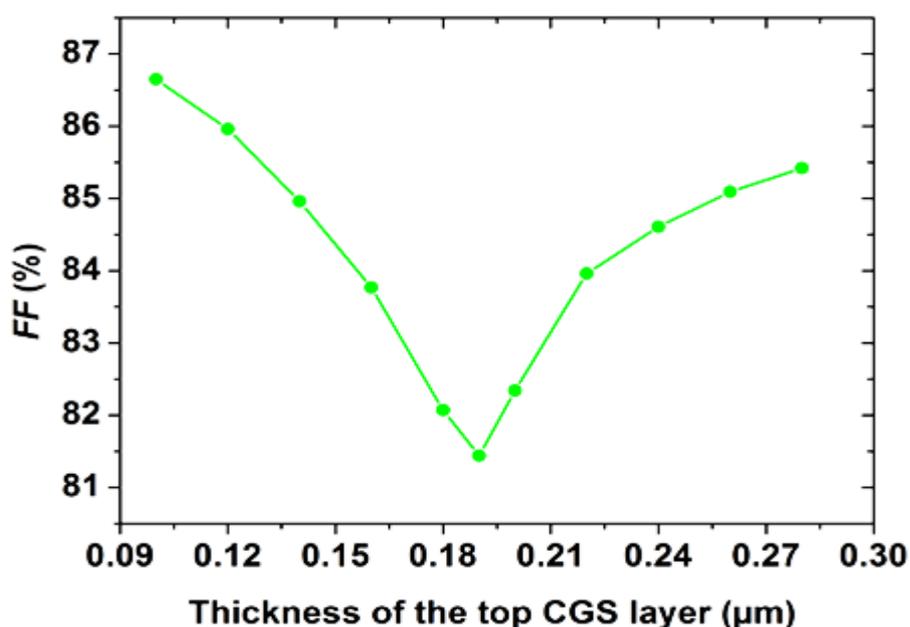
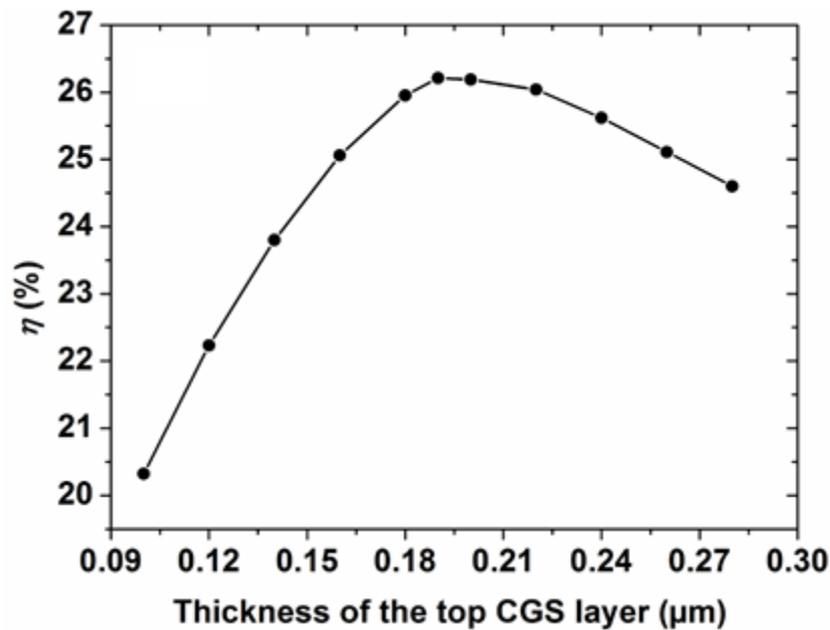


Figure V.17: le facteur de forme  $FF$  de la cellule solaire tandem en CGS/CIGS en fonction de l'épaisseur de la couche en CGS.

Enfin, dans la Figure (V.18) est tracé le rendement de conversion  $\eta$  de la cellule tandem en fonction de l'épaisseur de la couche CGS. De la même manière que  $J_{cc}$ , le rendement  $\eta$  de la cellule tandem présente un maximum de 26.21% à l'épaisseur de la couche CGS optimale

0.19  $\mu m$ , où se produit la condition d'égalité des courants entre les cellules supérieure et inférieure. Le  $\eta$  de la cellule tandem commence à augmenter de 20.32% à 0.1  $\mu m$  puis atteint un maximum 26.21%, après il diminue jusqu'à atteindre 24.5% à 0.28  $\mu m$ .

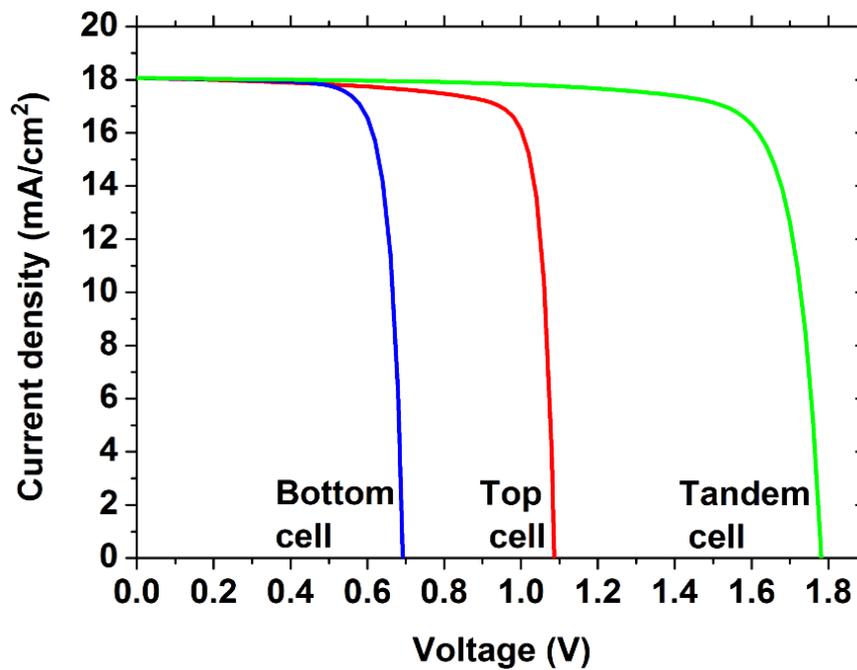


**Figure V.18:** Le rendement de conversion  $\eta$  de la cellule solaire tandem en CGS/CIGS en fonction de l'épaisseur en CGS.

Le décroissement de  $FF$  vers un minimum situé au point d'égalité des courants affaiblit légèrement la variation de  $\eta$ , mais l'augmentation considérable de  $J_{cc}$  soutenue par l'augmentation de  $V_{co}$  a balancé l'effet de la diminution de  $FF$  sur  $\eta$  et fournissant une tendance croissante de  $\eta$  avec un maximum localisé au point d'égalité des courants.

La caractéristique (J-V) des cellules supérieure et inférieure après optimisation, sous le spectre AM1.5G, est représentée par la figure (V.19). Les paramètres électriques correspondant à la cellule tandem CGS/CIGS sont résumés dans le tableau (V.7).

Les densités de courant de court-circuit des cellules supérieure, inférieure et tandem sont toutes égales à la valeur maximale de  $J_{cc}$  égale à 18.06  $mA/cm^2$ . La tension en circuit ouvert  $V_{co}$  de la cellule tandem de 1.78 V est égale à la somme des  $V_{co}$  des cellules supérieure (1.08 V) et inférieure (0.7 V).



**Figure V.19:** Caractéristiques (J-V) pour les cellules solaires supérieure en CGS, inférieure en CIGS et tandem en CGS/CIGS optimisées.

Le rendement  $\eta$  de la cellule tandem CGS/CIGS est amélioré à 26.21% pour le point d'égalité des courants ("current matching") à  $0.19 \mu m$  en comparaison avec le rendement de conversion 25.11% obtenu pour la cellule solaire tandem en CGS/CIGS dans le cas d'inégalité des courants ("current mismatching").

Type / paramètres	$J_{sc}(mA/cm^2)$	$V_{co} (V)$	$FF (%)$	$\eta (%)$
Cellule supérieure en CGS	18.06	1.08	82.88	16.26
Cellule inférieure en CIGS	18.06	0.70	79.46	9.93
Cellule tandem en CGS/CIGS	18.06	1.78	82.88	26.21

**Tableau V.7:** Les paramètres et caractéristiques de la cellule solaire tandem en CGS/CIGS dans le cas d'égalité des courants.

## V.6. Effet de la température sur la cellule solaire

L'éclairement solaire et la température sont deux paramètres extrêmement importants dans le fonctionnement des cellules solaires. Ils ont un impact direct sur la caractéristique  $I-V$  de la cellule solaire. D'où, l'importance de l'étude de l'influence de l'éclairement et de la température pour optimiser les performances des systèmes photovoltaïques puisqu'elles sont exposées au

rayonnement solaire. Dans cette section, nous allons élucider la sensibilité en température de l'énergie de la bande interdite du matériau CIGS et les performances de la cellule photovoltaïque tandem en CGS/CIGS. Ce travail sera utile pour prédire la performance de la cellule solaire dans la gamme de température 300K-400 K telles que la tension de circuit ouvert, le courant de court-circuit, le facteur de forme et le rendement de conversion pour le spectre AM1.5G.

### V.6.1. Dépendance de l'énergie de la bande interdite $E_g$ de la température

La variation de l'énergie du gap des deux matériaux CIGS et CGS pour différentes températures allant de 300 K-400 K est illustrée dans la figure (V.20). D'après cette figure, nous remarquons que l'énergie du gap diminue avec l'augmentation de la température pour les deux matériaux.

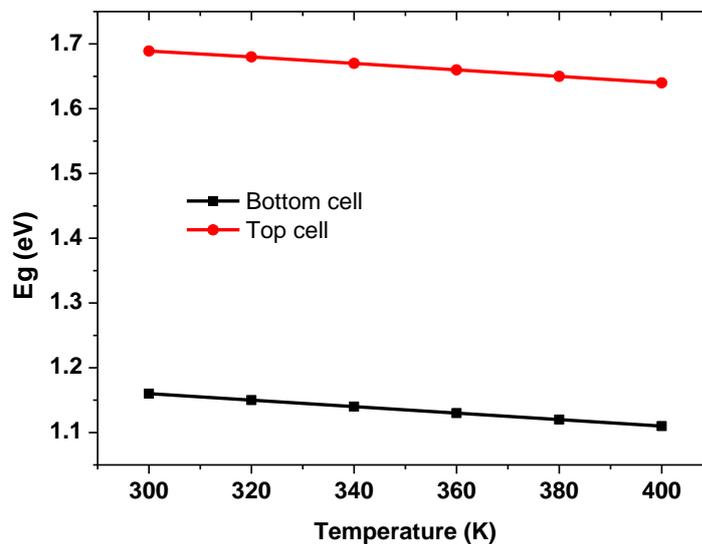


Figure V.20: Effet de la température sur l'énergie de la bande interdite des deux matériaux CGS et CIGS.

### V.6.2. Effet de la température sur la cellule solaire tandem optimisée

Après avoir optimisé la cellule solaire tandem en CGS/CIGS, nous allons maintenant étudier l'effet de la température sur ses caractéristiques dans l'intervalle de température de 300 à 400 K, Les résultats de la simulation sont représentés sur la figure (V.21).

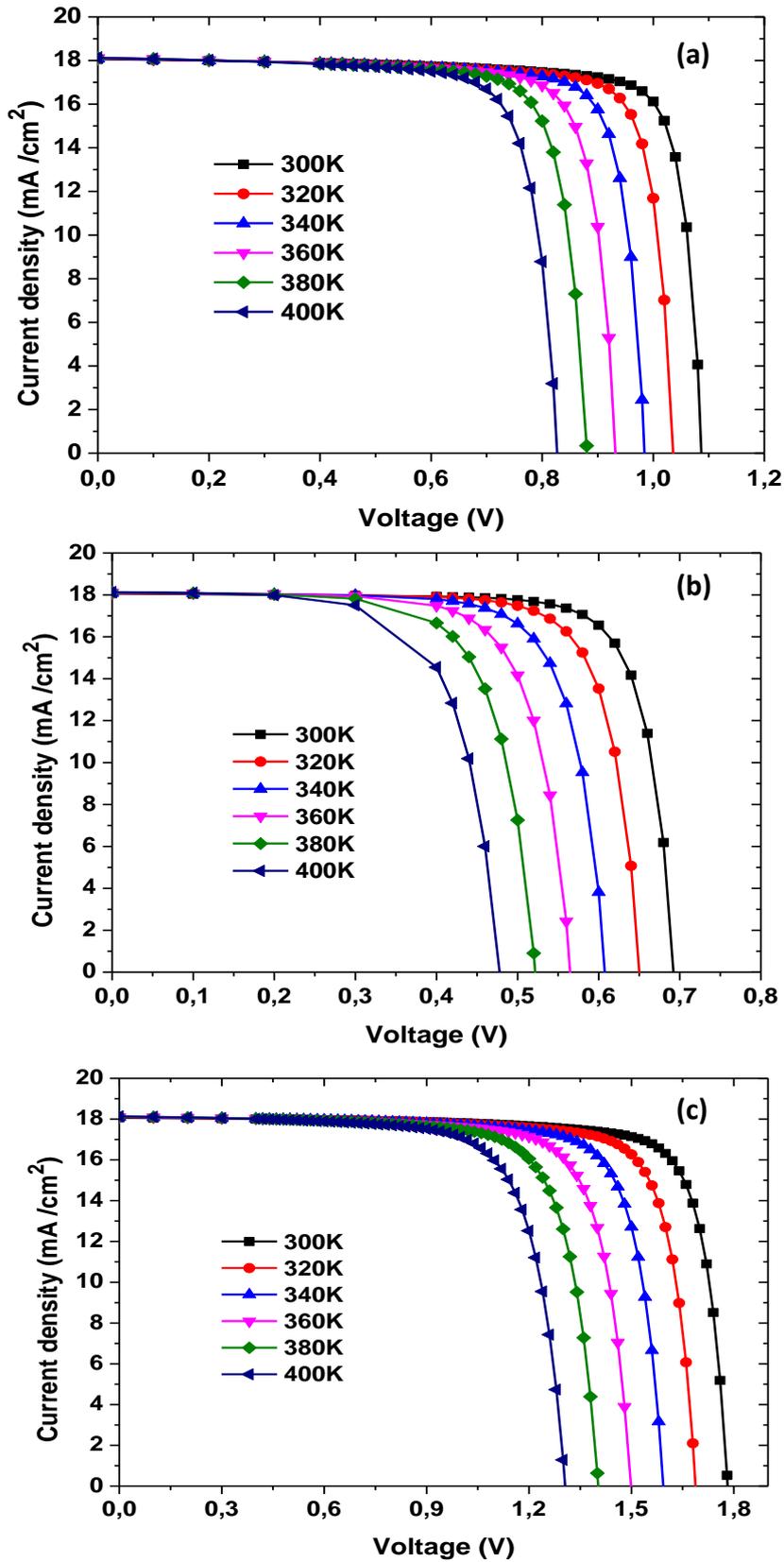


Figure V.21: Effet de la température sur les caractéristiques (J-V) de la : (a) cellule supérieure en CGS, (b) cellule inférieure en CIGS et (c) cellule tandem en CGS/CIGS.

D'après les caractéristiques (J-V) des cellules solaires inférieure en (CIGS), supérieure (CGS) and tandem en (CGS/CIGS) (figure V.21), on remarque une légère augmentation dans le photocourant  $J_{ph} \approx J_{sc}$ . Cela est dû à la diminution de la bande interdite  $E_g$  du semi-conducteur avec la température. En conséquence, la cellule solaire absorbe plus de photons de longueurs d'onde plus longues dans le spectre solaire et  $J_{sc}$  augmente.

Dans les équations (II.6) et (II.7) du chapitre (II) ou  $J_{ph} \approx J_{sc}$ , la tension de circuit ouvert  $V_{oc}$  dépend de  $J_0$ ,  $J_{cc}$  et  $E_g$ . La densité de courant de saturation inverse  $J_0$  correspond à la fuite (ou recombinaison) de porteurs minoritaires à travers la jonction p-n en inverse. Cette fuite est le résultat de la recombinaison dans les régions neutres de chaque côté de la jonction et  $J_0$  contrôle principalement la valeur de  $V_{oc}$  dans la cellule solaire. Les porteurs minoritaires sont générés thermiquement,  $J_0$  est très sensible au changement de la température.

La densité de courant de saturation inverse  $J_0$  pour la jonction p-n a été modélisée comme [98]:

$$J_0 = q \left( \frac{D_n}{L_n N_A} + \frac{D_p}{L_p N_D} \right) n_i^2 \quad \text{V.9}$$

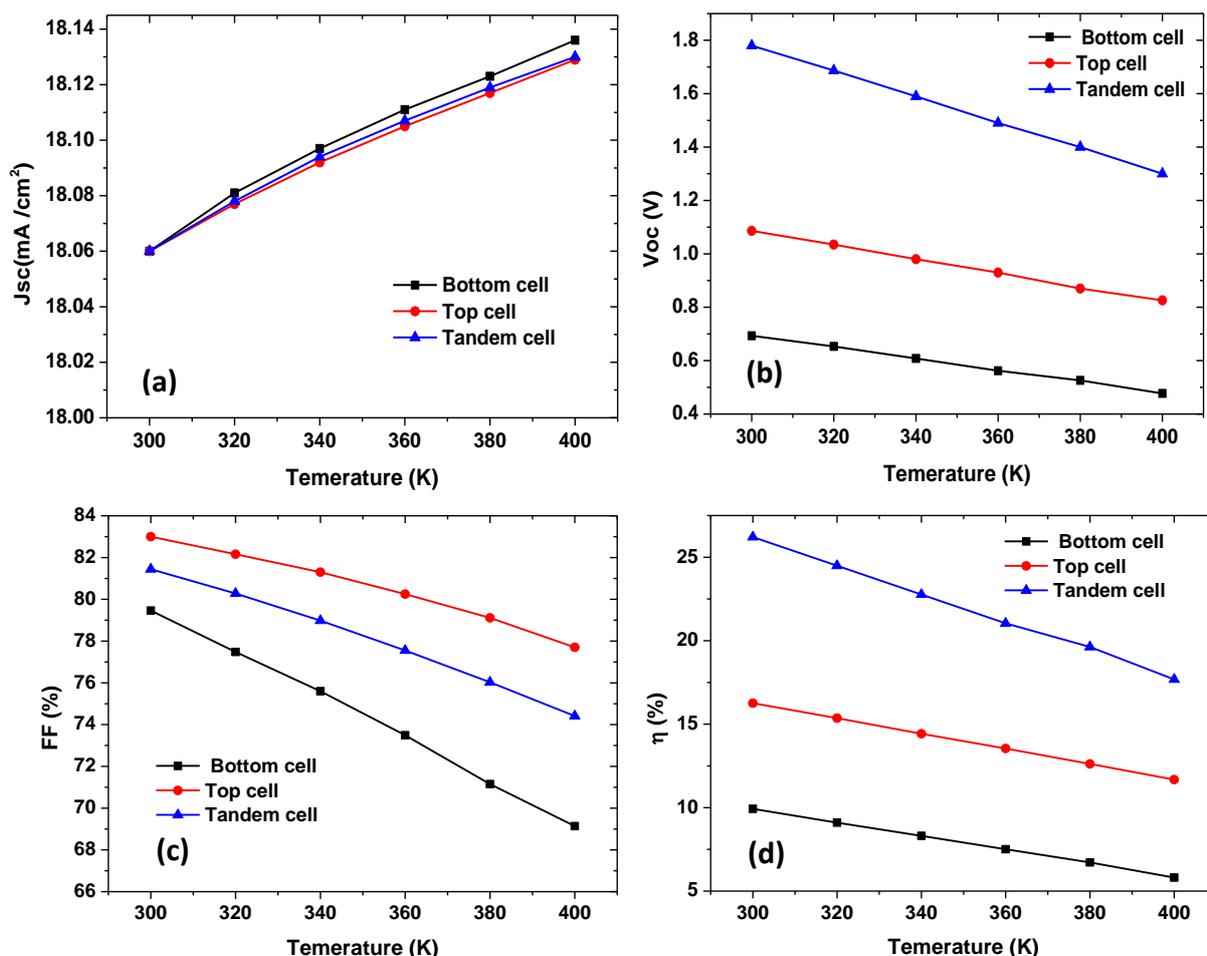
Avec  $n_i^2$  est donné par :

$$n_i^2 = N_c N_v \exp \left( -\frac{E_g}{kT} \right) \quad \text{V.10}$$

Où  $n_i$  : la densité intrinsèque des porteurs,  $N_A$  et  $N_D$  sont les densités des atomes accepteurs et donneurs,  $D_p$  et  $D_n$  sont des constantes de diffusion de porteurs minoritaires dans les région n et p,  $L_p$  et  $L_n$  sont des longueurs de diffusion de porteurs minoritaires dans les région n et p. En combinant les équations (V.9) et (V.10), l'expression de  $J_0$  peut s'écrire en fonction de T et  $E_g$  sous la forme suivante [99], [100]:

$$J_0(T) = C T^3 \exp \left( \frac{-E_g}{kT} \right) \quad \text{V.11}$$

La plage d'absorption de la cellule solaire s'élargit avec la diminution de la bande interdite du CGS et CIGS. En revanche, le courant à l'obscurité  $J_0$  augmente très rapidement avec l'augmentation de la température, ce qui se traduit par une diminution de la tension de circuit ouvert, le facteur de forme et le rendement de conversion des cellules solaires inférieure en (CIGS), supérieure en (CGS) et tandem en (CGS/CIGS) comme illustrés dans la figure (V.22. On remarque dans la figure (V. 22.a) une légère augmentation du photo courant dans les trois cellules.



**Figure V.22 : Effet de la température sur les paramètres des cellules solaires inférieure en CIGS, supérieure en CGS et tandem en CGS/CIGS :(a)  $J_{cc}$ , (b)  $V_{co}$ , (c) FF, (d)  $\eta$ .**

La tension de circuit ouvert dans la figure (V.22.b) se dégrade linéairement avec l'augmentation de la température, pour  $T = 300 K$  la valeur de  $V_{oc}$  est (1.086, 0.692, 1.78 V) et pour  $T = 400 K$  la valeur de  $V_{co}$  est (0.826, 0.47, 1.3 V) pour la cellule inférieure CIGS, la cellule supérieure CGS et la cellule tandem CGS/CIGS, respectivement. On remarque dans la figure (V.22.c) la dégradation du facteur de forme  $FF$  avec l'augmentation de température dans l'intervalle (300 – 400K). Cette dégradation est due à la diminution de  $V_{co}$  et l'augmentation de  $J_{sc}$ . Pour la figure (V.22.d), nous observons la diminution du rendement de conversion  $\eta$  causée par la diminution de  $V_{co}$  et  $FF$  avec la température.

Il a été montré dans la littérature que  $V_{oc}$  diminue avec l'accroissement de  $T$  alors que  $J_{sc}$  augmente légèrement avec l'augmentation de  $T$  [90], [101–103]. Les deux paramètres  $FF$  et  $\eta$  diminuent aussi avec l'augmentation de la température et la dégradation du rendement de conversion est principalement due à la diminution de  $V_{oc}$  [90], [101–103].

Le tableau (V.8) groupe les coefficients de température (TC) des paramètres photovoltaïques des cellules solaires supérieure, inférieure et tandem. La formule de calcul du coefficient de température (TC) des paramètres photovoltaïques ( $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ ,  $FF$ ,  $\eta$ ) est définie par l'équation (V.12)[104].

<i>Paramètres / Type de cellule</i>		<i>CGS</i>	<i>CIGS</i>	<i>CGS/CIGS</i>
<i>J<sub>sc</sub> à 300 K</i>	<i>J<sub>sc</sub> (mA/cm<sup>2</sup>)</i>	<i>18.06</i>	<i>18.06</i>	<i>18.06</i>
	<i>dJ<sub>sc</sub>/dT (mA/cm<sup>2</sup>/K)</i>	<i>9E-4</i>	<i>9.5E-4</i>	<i>8.75E-4</i>
	<i>TC (%/K)</i>	<i>0.005</i>	<i>0.0052</i>	<i>0.0048</i>
<i>V<sub>oc</sub> à 300 K</i>	<i>V<sub>oc</sub> (V)</i>	<i>1.08</i>	<i>0.7</i>	<i>1.78</i>
	<i>dV<sub>oc</sub>/dT (V/K)</i>	<i>-0.0027</i>	<i>-0.0022</i>	<i>-0.005</i>
	<i>TC (%/K)</i>	<i>-0.25</i>	<i>-0.32</i>	<i>-0.28</i>
<i>FF à 300 K</i>	<i>FF (%)</i>	<i>82.88</i>	<i>79.46</i>	<i>82.88</i>
	<i>dFF/dT (%/K)</i>	<i>-0.0367</i>	<i>-0.0957</i>	<i>-0.0593</i>
	<i>TC (%/K)</i>	<i>-0.044</i>	<i>-0.12</i>	<i>-0.072</i>
<i>η à 300 K</i>	<i>η (%)</i>	<i>16.26</i>	<i>9.93</i>	<i>26.21</i>
	<i>dη/dT (%/K)</i>	<i>-0.0477</i>	<i>-0.0414</i>	<i>-0.092</i>
	<i>TC (%/K)</i>	<i>-0.29</i>	<i>-0.41</i>	<i>-0.34</i>

**Tableau V.8 : Le coefficient de température (TC) des paramètres PV ( $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ ,  $FF$ ,  $\eta$ ) des cellules solaires supérieure en (CGS), inférieure en (CIGS) et tandem en (CGS/CIGS).**

$$TC = \frac{1}{parameter (T=300K)} \times \frac{d(parameter)}{dT} \times 100\% \quad V.12$$

Nous remarquons que la cellule solaire inférieure en CIGS est plus affectée par la température en comparaison avec la cellule supérieure en CGS et la cellule tandem en CGS/CIGS.

### V.6.3. Effet de l'épaisseur en CGS de la cellule supérieure en fonction de la température

Nous avons étudié pour chaque épaisseur de la couche CGS l'effet de la température dans la gamme (300K – 400K) dans le but d'optimiser notre cellule tandem en CGS/CIGS avec la variation de la température. Dans la Figure (V.23) sont tracées les densités de courant de court-circuit de la cellule supérieure, inférieure pour différentes températures et en fonction de l'épaisseur de la couche CGS.

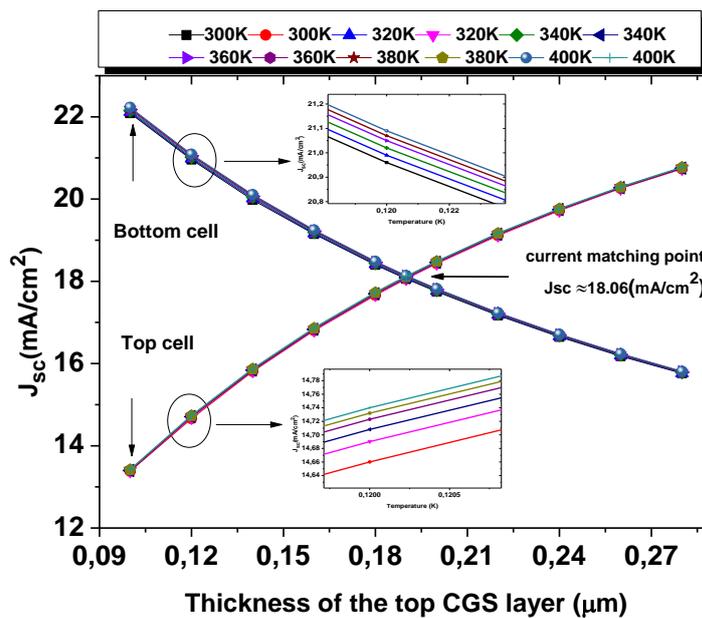


Figure V.23 : La densité de courant de court-circuit des cellules supérieure et inférieure en fonction de l'épaisseur de la couche en CGS dans la cellule tandem en CGS/CIGS pour différentes températures (300K – 400K).

Nous remarquons que l'augmentation de la température entraîne un faible accroissement de la densité de courant de court-circuit des cellules supérieure  $J_{cct}$  et inférieure  $J_{ccb}$ . Avec l'augmentation progressive de la couche CGS dans la cellule supérieure,  $J_{cct}$  est croissant et  $J_{ccb}$  est décroissant et se croisent à une épaisseur du CGS de 0.19  $\mu\text{m}$  où la condition d'égalité des courants :  $J_{cc} = J_{cct} = J_{ccb} = 18.06 \text{ mA}/\text{cm}^2$  est réalisée. Nous remarquons que l'augmentation de la température n'affecte pas le point de ("current matching") correspondant à 0.19  $\mu\text{m}$ .

Dans la figure (V.24), nous avons tracé les paramètres photovoltaïques simulés de la cellule tandem en fonction de la température (300K – 400K) et en fonction de l'épaisseur de la couche CGS (0.1 à 0.28 $\mu\text{m}$ ). Nous remarquons que les tendances de ces courbes sont identiques

à celles obtenue dans le cas de la simulation de la cellule tandem à 300K. Le rendement est toujours maximal au point de ("current matching") correspondant à 0.19  $\mu\text{m}$ .

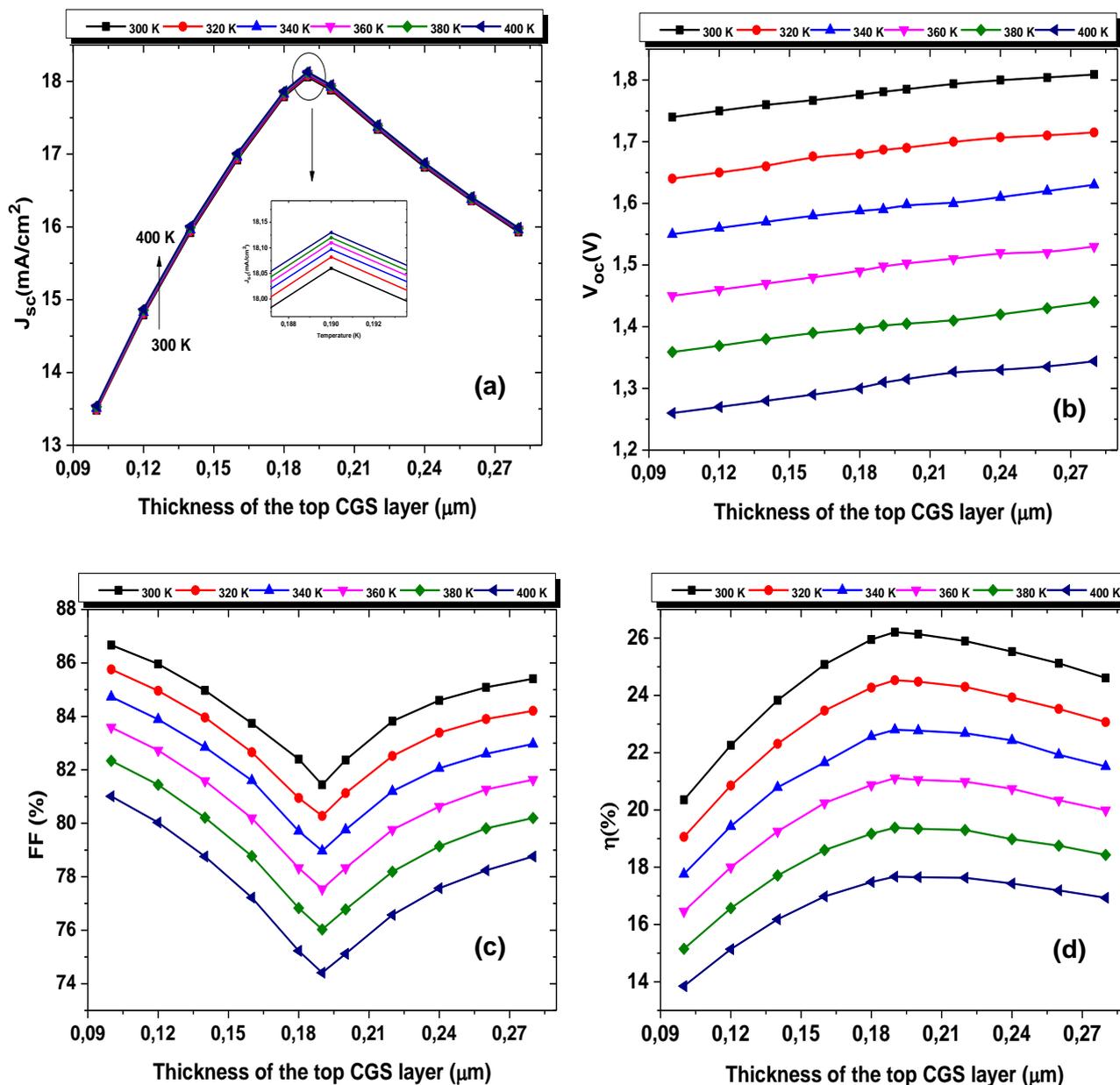


Figure V.24 : Simulation de paramètres photovoltaïques de la cellule solaire tandem en CGS/CIGS a variation de la température en fonction de l'épaisseur de la couche en CGS : (a) courant de court-circuit  $J_{cc}$ , (b) tension en circuit ouvert  $V_{co}$ , (c) facteur de forme FF et (d) rendement  $\eta$  pour différentes températures.

## **V.7. Conclusion**

Dans ce chapitre, nous avons présenté et discuté les résultats obtenus par simulation numérique des caractéristiques électriques d'une cellule solaire simple et double jonction en couches minces et à hétérojonction à base de CIGS, CGS. Ces résultats sont générés par le logiciel de simulation SILVACO-ATLAS.

Nous avons comparé les résultats de la simulation électrique de la cellule en CIGS, CGS avec ceux trouvés expérimentalement, ces résultats sont en accord avec ceux trouvés expérimentalement et par simulation. Ensuite, nous avons étudié la performance d'une cellule solaire tandem en CGS/CIGS à double jonction avec CGS comme cellule supérieure et GIGS comme cellule inférieure. Une amélioration de l'efficacité de conversion à 25.11% a été obtenue pour une structure (CGS/CIGS). Enfin, nous considérons l'épaisseur de la cellule supérieure (couche CGS) comme un paramètre clé pour améliorer encore les performances de la cellule solaire tandem. Avec une épaisseur fixe de la couche inférieure (couche CIGS) à 3.5  $\mu\text{m}$ , la maximisation de l'efficacité de la cellule tandem en (CGS/CIGS) à 26.21% est obtenue à une épaisseur optimale de la couche supérieure (couche CGS) de 0.19  $\mu\text{m}$ . Cette valeur assure la condition d'égalité du courant de court-circuit de la cellule solaire supérieure en CGS, la cellule solaire inférieure en CIGS et la cellule solaire tandem en (CGS/CIGS) de 18.06  $\text{mA}/\text{cm}^2$ .

Nous avons également étudié l'influence de la température sur la cellule tandem en (CGS/CIGS) et les cellules en CGS et CIGS. Pour la cellule tandem, nous avons remarqué que la dégradation de la tension, en fonction de la température, est linéaire et additive et que la cellule solaire inférieure CIGS est plus affectée par la température en comparaison avec la cellule supérieure en CGS et la cellule tandem en CGS/CIGS.

# **Conclusion générale**

## Conclusion générale

Dans ce travail nous avons effectué une simulation des cellules solaires simple jonction en couches minces et à hétérojonction à base de CGS et CIGS et une cellule solaire double jonction (tandem) formée d'une cellule supérieure en CGS et une cellule inférieure en CIGS. Pour cela, nous avons utilisé le logiciel Silvaco Atlas-2D pour simuler les caractéristiques électriques de ces cellules solaires.

Dans le premier chapitre, nous avons donné les notions fondamentales des matériaux semi-conducteurs tels que le Sélénium de Cuivre Indium et Gallium (CIGS), le sulfure de cadmium (CdS) et l'oxyde de zinc (ZnO) constituant nos cellules solaires à étudier. Le deuxième chapitre introduit des généralités concernant les cellules solaires en général et la cellule solaire simple à base de (CIGS) et (CGS) en particulier. Le troisième chapitre présente quelques notions de base indispensables sur les cellules solaires multi-jonction. Le quatrième chapitre décrit les équations fondamentales dans les semiconducteurs et le simulateur Atlas du logiciel Tcad-Silvaco utilisé pour la simulation électrique. Dans le cinquième chapitre, nous avons simulé des cellules simple jonction en (CIGS), (CGS) et tandem en (CGS/CIGS) en utilisant l'outil Atlas du logiciel Silvaco. Pour simuler les caractéristiques électriques d'une cellule solaire par Atlas, nous commençons par la définition de la structure de la cellule en spécifiant le maillage, les régions, les électrodes et le dopage. Après cela, vient l'étape de la définition des paramètres des matériaux et les modèles physiques décrivant le fonctionnement d'une cellule solaire.

La simulation numérique de la cellule solaire inférieure à base de ZnO/CdS/CIGS/Mo nous a permis de calculer les paramètres photovoltaïques qui caractérisent la cellule solaire. Les valeurs de ces paramètres photovoltaïques sont : La densité du courant de court-circuit  $J_{cc} = 35.44 \text{ mA/cm}^2$ , la tension en circuit ouvert  $V_{co} = 0.709 \text{ V}$ , le facteur de forme  $FF = 80.69 \%$  et le rendement de conversion  $\eta = 20.32 \%$ . Ces valeurs sont en accord avec les résultats expérimentalement existants dans la littérature et sont meilleurs que ceux obtenus par simulation d'une cellule solaire conventionnelle en CIGS avec une épaisseur de la couche tampon CdS (50 nm) et une épaisseur de couche absorbante CIGS (3.5  $\mu\text{m}$ ) en utilisant le simulateur SCAPS. Après cela, nous avons simulé la cellule solaire supérieure en ZnO/CdS/CGS/Mo et nous avons abouti à ces résultats : La densité du courant de court-circuit  $J_{cc} = 21.13 \text{ mA/cm}^2$ , la tension en circuit ouvert  $V_{co} = 1.11 \text{ V}$ , le facteur de forme  $FF = 80.42 \%$  et un rendement de conversion  $\eta = 18.92\%$ . Ces résultats sont obtenus après optimisation des concentrations de dopage CdS et CGS pour améliorer le rendement de conversion, le meilleur rendement obtenu est de 18.92%.

Une augmentation de ces rendements est prévue principalement en utilisant des cellules solaires double jonction (dénommées tandem) afin d'exploiter tout le spectre solaire. Dans ce contexte, nous avons effectué une simulation numérique d'une cellule solaire double Jonction (tandem) en ZnO/CdS/CGS/ZnO/CdS/CIGS/Mo ayant comme cellule supérieure en CGS et une cellule inférieure en GIGS connectées optiquement et électriquement avec une couche d'oxyde conducteur transparent (TCO) de ZnO. Les résultats de simulation obtenus sont tels que la  $J_{sc}$  de la cellule tandem est limitée par le faible courant de la cellule inférieure CIGS ayant pour valeur  $16.35 \text{ mA/cm}^2$  soit à peu près égale à la  $J_{sc}$  de la cellule inférieure de  $16.17 \text{ mA/cm}^2$ . D'autre part, la  $V_{co}$  de la cellule tandem ( $1.8 \text{ V}$ ) est exactement égale à la somme de la  $V_{cot}$  de la cellule supérieure ( $1.11 \text{ V}$ ) et de la  $V_{cob}$  de cellule inférieure ( $0.69 \text{ V}$ ). À partir de ces résultats, le bon fonctionnement des cellules CGS et CIGS connectées en série formant la cellule tandem est démontré. En outre, le facteur de forme  $FF$  de la cellule en tandem ( $85.09\%$ ) est supérieur à celui de la cellule supérieure ( $80,94\%$ ) et de la cellule inférieure ( $79.05\%$ ). De toute évidence, l'augmentation de  $V_{co}$  et  $FF$  de la cellule en tandem est la cause de l'amélioration de rendement à  $25.11\%$  par rapport à celui des cellules CIGS ( $20.32\%$ ) et CGS ( $18.92\%$ ). Le rendement simulé de  $25.11\%$  obtenu pour la cellule tandem en (GGS/CIGS) non optimisée ("current mismatching") est meilleur que ceux obtenus par simulation en utilisant les deux simulateurs Silvaco-Atlas et AMPS-1D et rapportés dans la littérature.

Pour obtenir un rendement de conversion maximal dans la cellule solaire tandem, il faut optimiser la structure de cellule tandem. Pour cela, nous avons varié l'épaisseur de la cellule supérieure CGS de  $0.1 \mu\text{m}$  à  $0.28 \mu\text{m}$  dans la cellule tandem en (CGS/CIGS). L'épaisseur de la cellule inférieure CIGS étant fixée à  $3.5 \mu\text{m}$ . Quand l'épaisseur de la couche CGS dans la cellule supérieure augmente, la  $J_{cct}$  de la cellule supérieure augmente et la  $J_{ccb}$  de la cellule inférieure diminue. C'est simplement parce que la cellule supérieure absorbe plus de lumière et laisser passer moins de lumière à la cellule inférieure. Avec l'augmentation progressive de l'épaisseur de la couche CGS de la cellule supérieure, la  $J_{cct}$  croissant et la  $J_{ccb}$  décroissant se croisent à une épaisseur CGS optimale de  $0.19 \mu\text{m}$  où la condition d'égalité des courants ("current matching condition")  $J_{sc} = J_{sct} = J_{scb} = 18.06 \text{ mA/cm}^2$  est réalisée.

La  $V_{cot}$  de la cellule solaire supérieure augmente avec l'épaisseur de la couche CGS. Ceci est principalement dû au fait que la couche absorbante CGS absorbe plus de photons ayant des longueurs d'onde plus longues, ce qui contribue à la génération de paires électron-trou. Cependant, le  $V_{cob}$  de la cellule inférieure est presque indépendant de la variation de l'épaisseur de la couche CGS. Avec une épaisseur fixe de la couche inférieure (couche CIGS) à  $3.5 \mu\text{m}$ , la

valeur maximale de rendement de la cellule tandem en (CGS/CIGS) à 26.21% est obtenu à une épaisseur optimale de la couche supérieure (couche CGS) de 0.19  $\mu m$ .

Enfin, nous avons étudié l'effet de la température sur les caractéristiques de la cellule solaire tandem optimisée (CGS/CIGS) et les cellules en CGS et CIGS dans l'intervalle de température de 300 à 400  $K$ . A partir des résultats de simulation, nous avons montré que l'augmentation de la température provoque une dégradation de la tension en circuit ouvert, du facteur de forme et du rendement de conversion de ces cellules. La diminution de la tension en circuit ouvert est considérée comme importante en comparaison avec l'augmentation faible du courant de court-circuit. Nous avons remarqué que la dégradation de la tension en circuit ouvert en fonction de la température est linéaire et additive et que la cellule solaire inférieure CIGS est plus affectée par la température en comparaison avec la cellule supérieure en CGS et la cellule tandem en CGS/CIGS.

Comme perspective à ce travail :

Nous souhaitons simuler et modéliser des cellules photovoltaïques :

- Triple jonctions à base de (CIS, CGS et CIGS) avec couche tampon en CdS et ZnO comme une couche d'oxyde conducteur transparent (TCO).
- Cellules tandem et triple à base de CIS, CGS et CIGS avec couche tampon en ZnS.
- Cellule tandem à base de CGS/CIGS connectées avec diode tunnel.

# **Références bibliographiques**

**Références bibliographiques**

- [1] M. Yamaguchi, "Radiation resistance of compound semiconductor solar cells resistance of compound semiconductor solar cells," *J. Appl. Phys.*, vol. 78, no. 1995, pp. 1476–1480, 1995.
- [2] H. S. Ullal, K. Zweibel, and B. G. Von Roedern, "Current status of polycrystalline thin-film PV technologies," *Proc. 26th IEEE Photovolt. Spec. Conf., Anaheim, California*, no. September, 1997.
- [3] P. Jackson *et al.*, "New world record efficiency for Cu ( In , Ga ) Se<sub>2</sub> thin-film solar cells beyond 20 %," *Prog. Photovoltaics Res. Appl.*, no. January, pp. 894–897, 2011.
- [4] I. Repins *et al.*, "Characterization of 19.9%-efficient CIGS absorbers," *Natl. Renew. Energy Lab.*, vol. 33, pp. 1–6, 2008.
- [5] M. Edoff, "Thin film solar cells: research in an industrial perspective," *Ambio*, vol. 41, no. SUPPL.2, pp. 112–118, 2012.
- [6] I. Repins *et al.*, "19.9 % efficient ZnO/CdS/ CuInGaSe<sub>2</sub> solar cell with 81.2 % fill factor," *Prog. photovoltaics Res. Appl.*, vol. 16, pp. 235–239, 2008.
- [7] W. Shockley and H. J. Queisser, "Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells," *J. Appl. Phys.*, vol. 32, no. 3, pp. 510–519, 1961.
- [8] M. A. Green, "Third generation photovoltaics: Ultra-high conversion efficiency at low cost," *Prog. Photovoltaics Res. Appl.*, vol. 9, no. 2, pp. 123–135, 2001.
- [9] M. A. Green, Y. Emery, Keith Hishikawa, W. Warta, and E. D. Dunlop, "Solar cell efficiency tables (version 42)," *Prog. Photovolt Res. Appl.*, vol. 21, pp. 827–837, 2013.
- [10] H. Cotal *et al.*, "III–V multijunction solar cells for concentrating photovoltaics," *Energy Environ. Sci.*, vol. 2, no. 2, pp. 174–192, 2009.
- [11] C. H. Huang, "Effects of Ga content on Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> solar cells studied by numerical modeling," *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 69, no. 2–3, pp. 330–334, 2008.
- [12] S. Ho. Song, E. S. Aydil, and S. A. Campbell, "Metal-oxide broken-gap tunnel junction for copper indium gallium diselenide tandem solar cells," *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 133, pp. 133–142, 2015.
- [13] J. Song *et al.*, "Modeling and simulation of a CuGaSe<sub>2</sub>/Cu(In<sub>1-x</sub>,Ga<sub>x</sub>)Se<sub>2</sub> tandem solar cell," *3rd World Conf. Photovolt. Energy Convers.*, vol. 1, pp. 555–558, 2003.

- [14] Y. G. Xiao, Z. Q. Li, M. Lestrade, and Z. M. S. Li, “Modeling of CdZnTe and CIGS and tandem solar cells,” *Conf. Rec. IEEE Photovolt. Spec. Conf.*, no. 604, pp. 1990–1994, 2010.
- [15] Z. Beiley, A. Bowring and M. D. McGehee, “Modeling low-cost hybrid tandem photovoltaics with power conversion efficiencies exceeding 20%,” *Photovolt. Spec. Conf. (PVSC), 38th IEEE*, pp. 3129–3130, 2012.
- [16] S. Seyrling *et al.*, “Development of multijunction thin film solar cells,” *Conf. Rec. IEEE Photovolt. Spec. Conf.*, pp. 000622–000625, 2009.
- [17] P. Liska *et al.*, “Nanocrystalline dye-sensitized solar cell/copper indium gallium selenide thin-film tandem showing greater than 15% conversion efficiency,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 88, no. 20, 2006.
- [18] W. S. Jeong, J. W. Lee, S. Jung, J. H. Yun, and N. G. Park, “Evaluation of external quantum efficiency of a 12.35% tandem solar cell comprising dye-sensitized and CIGS solar cells,” *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 95, no. 12, pp. 3419–3423, 2011.
- [19] W. L. Wang *et al.*, “Experimental and simulation analysis of the dye sensitized solar cell/Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> solar cell tandem structure,” *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 94, no. 10, pp. 1753–1758, 2010.
- [20] J. L. Gray, “Chapter 3: The Physics of the Solar Cell,” in « *Handbook of Photovoltaic Science and Engineering* », John Wiley & Sons Inc., 2011, pp. 82–128.
- [21] T. Nakada, S. Kijima, and Y. Kuromiya, “Chalcopyrite thin-film tandem solar cells with 1.5 V open-circuit-voltage,” *Conf. Rec. 2006 IEEE 4th World Conf. Photovolt. Energy Conversion, WCPEC-4*, vol. 1, pp. 400–403, 2007.
- [22] S. Nishiwaki, S. Siebentritt, P. Walk, and M. C. Lux-Steiner, “A stacked chalcopyrite thin-film tandem solar cell with 1.2 V open-circuit voltage,” *Prog. Photovoltaics Res. Appl.*, vol. 11, no. 4, pp. 243–248, 2003.
- [23] D-H. Jun *et al.*, “The effects of growth temperature and substrate tilt angle on GaInP/GaAs tandem solar cells.” *Journal of Semiconductor Technology and Science*, pp., vol. 9, pp. 91–97, 2009.
- [24] ATLAS, “Atlas User’s Manual, device simulation software ,” Santa Clara, USA: Silvaco, Inc, 2015.
- [25] A. Chovet and P. Masson, “Physique des semi-conducteurs,” *Ec. Polytech. Univ. Marseille*, 2005.

- [26] S. Wagner, J. L. Shay, and P. Migliorato, "CuInSe<sub>2</sub>/CdS heterojunction photoVoltaic detectors," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 25, no. 8, pp. 434–435, 1974.
- [27] "www.lenntech.fr/periodique/elements." .
- [28] U. Rau and H. W. Schock, "Chapiter IC-3 :Cu ( In , Ga ) Se<sub>2</sub> Thin-Film Solar Cells," in «*Practical Handbook of Photovoltaics*», Elsevier Ltd, 2012, pp. 323–372.
- [29] J. E. Jaffe and A. Zunger, "Defect-induced nonpolar-to-polar transition at the surface of CuInSe<sub>2</sub>," *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 64, pp. 1547–1552, 2003.
- [30] A. Duchatelet, "Synthèse de couches minces de Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> pour cellules solaires par électrodépôt d'oxydes mixtes de cuivre-indium-gallium," *thèse PhD, Univ. Lille 1*, 2012.
- [31] P. Panse, "Copper gallium diselenide solar cells : Processing , characterization and simulation studies," *These PhD, Univ. South Florida*, 2003.
- [32] K. Fotis, "Modeling and simulation of a dual-junction cigs solar cell using silvaco atlas.," *Master's Thesis, Nav. Postgrad. Sch.*, 2012.
- [33] Tom Markvart and Luis Castafier., "Practical Handbook of Photovoltaics: Fundamentals and Applications," *Elsevier Adv. Technol.*, 2003.
- [34] S. R. Kodigala, *Thin Films and Nanostructures: Cu(In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>)Se<sub>2</sub> Based Thin Film Solar Cells*. Academic Press is an Imprint of Elsevier, 2010.
- [35] S. F. Zohra, "Application de la spectroscopie de photoacoustique dans l'analyse des propriétés optiques des effets d'implantation de Ne<sup>+</sup> et de Xe<sup>+</sup> dans CuInSe<sub>2</sub>," *thèse PhD, Univ. Ferhat Abbas - Sétif*, 2012.
- [36] P. D. Paulson, R. W. Birkmire, W. N. Shafarman, P. D. Paulson, R. W. Birkmire, and W. N. Shafarman, "Optical characterization of CuIn<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>Se<sub>2</sub> alloy thin films by spectroscopic ellipsometry," *J. Appl. Phys.*, vol. 879, 2003.
- [37] R. Hunger, C. Pettenkofer, and R. Scheer, "Surface properties of (111), (001), and (110)-oriented epitaxial CuInS<sub>2</sub>/Si films," *Surf. Sci.*, vol. 477, no. 1, pp. 76–93, 2001.
- [38] S. N. Sharma, R. K. Sharma, K. N. Sood, and S. Singh, "Structural and morphological studies of chemical bath-deposited nanocrystalline CdS films and its alloys Structural and morphological studies of chemical bath-deposited," *Mater. Chem. Phys.*, vol. 93, no. October, 2005.
- [39] A Ates, M Kundakci, Y Akaltun, B Gurbulak, "Effective mass calculation for InSe, InSe:Er crystals," *Phys. E*, pp. 217–220, 2007.

- [40] R. Schock, *Chalcogenide Photovoltaics : Physics, Technologies, and Thin Film Devices*. Wiley-Vch, 2011.
- [41] X. Liu and T. Xing, “First-principles calculations of electronic structures and optical properties of group-III A elements doped wurtzite CdS,” *Solid State Commun.*, vol. 187, pp. 72–76, 2014.
- [42] L. Wenyi, C. Xun, C. Qiulong, and Z. Zhibin, “Influence of growth process on the structural , optical and electrical properties of CBD-CdS films,” *Mater. Lett.*, vol. 59, pp. 1–5, 2005.
- [43] S. Prabakar, M. Dhanam, “CdS thin films from two different chemical baths—structural and optical analysis,” *J. Cryst. Growth*, vol. 285, pp. 41–48, 2005.
- [44] E. Çetinörgü, C. Gümü, and R. Esen, “Effects of deposition time and temperature on the optical properties of air-annealed chemical bath deposited CdS films,” *Thin Solid Films*, vol. 515, pp. 1688–1693, 2006.
- [45] D. Soubane, “Élaboration et Caractérisation des Films Absorbants I-II-VI<sub>2</sub> {CuInSe<sub>2</sub>, CuInS<sub>2</sub>, CuIn(S<sub>e</sub>,S)<sub>2</sub> et Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub>}, Film Buffer I-VI CdS et Nano Fenêtre Optique ZnO, Destinés à la Fabrication des Cellules Solaires à Faible Coût de Revient,” *thèse Dr. en Sci. Univ. Ibn Zohr Agadir- Maroc*, 2007.
- [46] Z. Sofian, “Contributions a l’ etude des proprietess optiques et nonlin eaires de nanoparticules en couches minces a base de ZnO,” *thèse PhD ,Université d’Angers - Univ. d’Ibn Tofail*, 2007.
- [47] T. Brouri, “Elaboration et etude des proprities et electriques des couches minces et des nanofils de ZnO,” *Thèse PhD, Univ. Paris-Est Champ*, 2011.
- [48] Z. C. Feng, *Handbook of Zinc Oxide and Related Materials : Volume One, Materials*. Taylor & Francis Group, LLC, CRC Press, 2013.
- [49] J. T. Chen *et al.*, “Applied Surface Science The effect of Al doping on the morphology and optical property of ZnO nanostructures prepared by hydrothermal process,” *Appl. Surf. Sci.*, vol. 255, pp. 3959–3964, 2009.
- [50] K. F. Konan, B. Hartiti, B. Aka, A. Ridah, K. Dakhsi, and Y. A. P. Thevenin, “Propriétés structurales et optiques de couches minces d’oxyde de zinc (ZnO) texturées (002) par voie sol-gel via spin-coating,” *Afrique Sci.*, vol. 6, no. 1, pp. 29–37, 2010.
- [51] I. Repins, S. Glynn, J. Duenow, T. J. Coutts, W. Metzger, and M. A. Contreras, “Required materials properties for high-efficiency CIGS modules preprint,” *Proc. SPIE 7409, Thin*

- Film Sol. Technol.* 74090M, no. July, 2009.
- [52] S. Benramache, “Elaboration et caractérisation des couches minces de ZnO dopées cobalt et indium,” *these Dr. en Sci. Univ. biskra*, 2012.
- [53] S.R. Wenham, M.A. Green, M.E. Watt, R. Corkish, “Applied photovoltaics,” *Earthscan UK USA*, 2007.
- [54] “[http://rredc.nrel.gov/solar/spectra/am1.5/.](http://rredc.nrel.gov/solar/spectra/am1.5/),” *NREL : Reference Solar Spectrum Irradiance*, 2016. .
- [55] M. Cooke, “Lighting up CIGS PVs,” *Semiconductor today, compounds & advanced Silicon*. pp. 52–56, 2008.
- [56] A. Hichem, “Propriétés électriques de cellule solaire à base de diSéléniure de Cuivre Indium Galium  $\text{CuIn}_{(1-x)}\text{Ga}_x\text{Se}_2$  (CIGS),” *Mémoire magister, Univ. biskra*, 2015.
- [57] Tom Markvart and L. Castafier, *Solar Cells: Materials, Manufacture and Operation*, First edit. Elsevier Ltd, 2005.
- [58] C. Roger, “Développement de cellules photovoltaïques à base de CIGS sur substrats métalliques,” *these PhD, université de Grenoble*, 2013.
- [59] D. Diouf, “Cellules photovoltaïques silicium à hétérojonctions et à structure interdigitée en face arrière,” *These PhD, Univ. paris-sud11*, 2010.
- [60] M. Ali, R. Engelken, and R. Sharma, “Progress in indium ( III ) sulfide (  $\text{In}_2\text{S}_3$  ) buffer layer deposition techniques for CIS , CIGS , and CdTe-based thin film solar cells,” *Sol. Energy*, vol. 120, pp. 131–146, 2015.
- [61] U. P. Singh and S. P. Patra, “Progress in Polycrystalline Thin-Film  $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$  Solar Cells,” *Int. J. Photoenergy*, vol. 2010, 2010.
- [62] M. Tomassini, “Synthèse de couches minces de molybdène et application au sein des cellules solaires à base de  $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$  co-évaaporé,” *Thèse PhD, Université de Nantes*, 2013.
- [63] F. Kessler, D. Herrmann, and M. Powalla, “Approaches to flexible CIGS thin-film solar cells,” *Thin Solid Films*, vol. 481, pp. 491–498, 2005.
- [64] K. Granath, M. Bodega, and L. Stolt, “The effect of NaF on  $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$  thin film solar cells,” *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 60, pp. 279–293, 2000.
- [65] K. Orgassa, H. W. Schock, and J. H. Werner, “Alternative back contact materials for thin film  $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$  solar cells,” *Thin Solid Films*, vol. 431–432, no. 3, pp. 387–391,

- 2003.
- [66] N. Kohara, S. Nishiwaki, Y. Hashimoto, T. Negami, and T. Wada, “Electrical properties of the Cu ( In , Ga ) Se<sub>2</sub> / MoSe / Mo structure,” *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 67, pp. 3–4, 2001.
- [67] M. Buffiere, “Synthèse et caractérisation de couches minces de Zn ( O , S ) pour application au sein des cellules solaires à base de Cu ( In , Ga ) Se<sub>2</sub>,” *These PhD ,Universite Nantes*, 2011.
- [68] N. Naghavi *et al.*, “Buffer layers and transparent conducting oxides for chalcopyrite Cu ( In , Ga )( S , Se )<sub>2</sub> based thin film photovoltaics : present status and current developments,” *Prog. Photovoltaics Res. Appl. Prog.*, vol. 18, pp. 411–433, 2010.
- [69] A. Romeo *et al.*, “Development of Thin-film Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> and CdTe Solar Cells ”,” *Prog. Photovoltaics Res. Appl.*, vol. 111, no. October 2003, pp. 93–111, 2004.
- [70] T. Nakada, Y. Hirabayashi, T. Tokado, D. Ohmori, and T. Mise, “Novel device structure for Cu ( In , Ga ) Se<sub>2</sub> thin film solar cells using transparent conducting oxide back and front contacts,” *Sol. Energy*, vol. 77, pp. 739–747, 2004.
- [71] Y. Hagiwara, T. Nakada, and A. Kunioka, “Improved J in CIGS thin film solar cells using a transparent conducting ZnO : B window layer,” *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 67, pp. 267–271, 2001.
- [72] D. Lincot, J-F. Guillemoles “Cellules solaires en couches minces a base de CuInSe<sub>2</sub>,” *Inst. Rech. Développement sur l'Énergie Photovoltaïque Artic. Dispon. sur le site <https://www.refletsdelaphysique.fr/articles/refdp/pdf/2007/03/refdp20075p16.pdf>*, pp. 16–19, 2007.
- [73] D. A. Columbus, “Design and optimization of copper indium gallium selenide solar cells for lightweight battlefield application,” *Master’s Thesis, Nav. Postgrad. Sch. Monterey, Calif.*, 2014.
- [74] M. Contreras *et al.*, “Improved Energy conversion efficiency in wide-bandgap Cu ( In , Ga ) Se<sub>2</sub> solar cells preprint,” *37th IEEE Photovolt. Spec. Conf. (PVSC 37*, no. July, 2011.
- [75] M. Abderrezek, “Modélisation des cellules solaires tandem à couches minces et à haut rendement,” *these Dr. en Sci. Univ. Setif -I*, 2015.
- [76] T. Todorov, O. Gunawan, and S. Guha, “A road towards 25% efficiency and beyond: perovskite tandem solar cells,” *Mol. Syst. Des. Eng.*, vol. 1, pp. 370–376, 2016.
- [77] J. M. Olson, D. J. Friedman and S. Kurtz, “Chapter 8 : High-efficiency III–V

- Multijunction Solar Cells,” in « *Handbook of Photovoltaic Science and Engineering* », John Wiley & Sons Inc., 2011, pp. 314–360.
- [78] F. Bouhdjar, “Etude et simulation numérique des cellules solaires à hétérojonction (a-Si:H/ $\mu\text{c-Si:H}$ ),” *these PhD. , Univ. Biskra*, 2016.
- [79] A. Shah, “Thin-film silicon solar cells,” EPFL Press, 2010.
- [80] P. Mahawela *et al.*, “II – VI compounds as the top absorbers in tandem solar cell structures,” *Mater. Sci. Eng.*, vol. 116, pp. 283–291, 2005.
- [81] G. Černivec, M. Burgelman F. Smole, “Investigation of the electronic properties of the recombination heterointerface in CGS/CIGS monolithic tandem solar cell,” *Proc. NUMOS*, no. March, pp. 297–309, 2007.
- [82] K. Kim *et al.*, “Performance prediction of chalcopyrite-based dual-junction tandem solar cells,” *Sol. Energy*, vol. 155, pp. 167–177, 2017.
- [83] C. K. Sarkar, “Technology computer aided design: Simulation for VLSI MOSFET,” in *CRC Press*, 2013.
- [84] M. Elbar and S. Tobbeche, “Numerical simulation of CGS/CIGS single and tandem thin-film solar cells using the Silvaco-Atlas software,” *Energy Procedia*, vol. 74, pp. 1220–1227, 2015.
- [85] M. Elbar, S. Tobbeche, and A. Merazga, “Effect of top-cell CGS thickness on the performance of CGS/CIGS tandem solar cell,” *Sol. Energy*, vol. 122, pp. 104–112, 2015.
- [86] G. A. Landis, “Numerical modeling of CIGS and CdTe solar cells: setting the baseline,” *Proc. Third World Conf. Photovolt. energy Convers.*, 2003.
- [87] S. Ouédraogo, F. Zougmore, and J. M. B. Ndjaka, “Computational analysis of the effect of the surface defect layer (SDL) properties on Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub>-based solar cell performances,” *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 75, no. 5, pp. 688–695, 2014.
- [88] N. Jankovic, “Numerical simulations of N-type CdSe poly-TFT electrical characteristics with trap density models of Atlas/Silvaco,” *Microelectron. Reliab.*, vol. 52, no. 11, pp. 2537–2541, 2012.
- [89] R. Scheer, “Towards an electronic model for CuIn<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>Se<sub>2</sub> solar cells,” *Thin Solid Films*, vol. 519, no. 21, pp. 7472–7475, 2011.
- [90] S. M. Sze, “Physics of Semiconductor Devices,” John Wiley & Sons, NewYork, 1981.
- [91] W. N. Shafarman and L. Stolt, “Chapter 13: Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> Solar Cells,” in « *Handbook of*

- Photovoltaic Science and Engineering* », John Wiley & Sons Inc., 2011, pp. 567–616.
- [92] N. Amin, M. Tang, and K. Sopian, “Numerical modeling of the Copper-Indium-Selenium (CIS) based solar cell performance by AMPS-1D,” *5th Student Conf. Res. Dev. SCORED*, no. December, pp. 1–6, 2007.
- [93] X. Shang *et al.*, “A numerical simulation study of CuInS<sub>2</sub> solar cells,” *Thin Solid Films*, vol. 550, pp. 649–653, 2014.
- [94] E. Palik, “Handbook of optical constants of solids III,” *Boston Academic press, San Diego, London*. 1998.
- [95] M. Richter *et al.*, “Optical characterization and modeling of Cu(In,Ga)(Se,S)<sub>2</sub> solar cells with spectroscopic ellipsometry and coherent numerical simulation,” *Thin Solid Films*, vol. 535, no. 1, pp. 331–335, 2013.
- [96] P. Chelvanathan, M. I. Hossain, and N. Amin, “Performance analysis of copper-indium-gallium-diselenide (CIGS) solar cells with various buffer layers by SCAPS,” *Curr. Appl. Phys.*, vol. 10, no. SUPPL. 3, pp. 387–391, 2010.
- [97] J. Song, T. J. Anderson, and S. S. Li, “Material parameter sensitivity study on CIGS solar cell performance,” *Photovolt. Spec. Conf. '08. 33rd IEEE.*, 2008.
- [98] Singh P and N.M. Ravindra, “Temperature dependence of solar cell performance — an analysis,” *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 101, pp. 36–45, 2012.
- [99] G. Siefer and Andreas W. Bett, “Temperature coefficients for III – V multi- junction concentrator cells,” *Prog. Photovoltaics Res. Appl.*, no. May 2014, 2012.
- [100] ME. Nell, AM. Barnett, “The Spectral p-n junction model for tandem solar-cell design,” *IEEE Trans. Electron Devices*, no. 2, p. 257–266., 1987.
- [101] J. J. Wysocki and P. Rappaport, “Effect of temperature on photovoltaic solar energy conversion,” *J. Appl. Phys.*, vol. 31, pp. 571–578, 1960.
- [102] M.A. Contreras *et al.*, “ZnO/ZnS(O,OH)/Cu(In,Ga)Se/sub 2//Mo solar cell with 18.6% efficiency,” in *Proceedings 3rd World Conf. Photovolt. Energy Convers.*, pp. 570–573, 2003.
- [103] G. Landis, R. Rafealle, D. Merritt, “High-temperature solar cell development,” *19 th Eur. Photovolt. science Eng. Conf. Pris, France*, pp. 241–247, 2004.
- [104] I. A. Yunaz *et al.*, “ Effects of temperature and spectral irradiance on performance of silicon-based thin film multijunction solar cells,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 46, No. 4A, pp. 1398–1403, 2007.

# **Publications et communications**

**Publications et communications**

- Elbar, M. and S. Tobbeche. 2015. “Numerical Simulation of CGS / CIGS Single and Tandem Thin-Film Solar Cells Using the Silvaco-Atlas Software.” *Energy Procedia* 74:1220–27. (<http://dx.doi.org/10.1016/j.egypro.2015.07.766>).
- Elbar, M., S. Tobbeche, and A. Merazga. 2015. “Effect of Top-Cell CGS Thickness on the Performance of CGS / CIGS Tandem Solar Cell.” *SOLAR ENERGY* 122:104–12. (<http://dx.doi.org/10.1016/j.solener.2015.08.029>).
- Elbar, M. and S. Tobbeche. “Numerical Simulation of CGS / CIGS Single and Tandem Thin-Film Solar Cells Using the Silvaco-Atlas Software.” International Conference on Technologies and Materials for Renewable Energy, Environment and Sustainability (TMREES’15), 2015.
- Mourad ELBAR, Souad TOBBECHE, Mohamed Nadjib KATEB, and Mohamed Redha SERDOUK “Photovoltaic performance of a CGS/CIGS tandem solar cell. ” International Conference on Electronics and New Technologies (ICENT’2017) , 2017.

Available online at [www.sciencedirect.com](http://www.sciencedirect.com)

ScienceDirect

Energy Procedia 74 (2015) 1220 – 1227

---



---

Energy  
**Procedia**


---



---

International Conference on Technologies and Materials for Renewable Energy, Environment and Sustainability, TMREES15

## Numerical simulation of CGS/CIGS single and tandem thin-film solar cells using the Silvaco-Atlas software

M. Elbar\* and S. Tobbeche

*Laboratoire des Matériaux Semi-conducteurs et Métalliques, Faculté des Sciences et de la Technologie,  
Département de Génie-Electrique, Université de Biskra, B.P 145, Biskra 07000, Algérie.*

### Abstract

In this work, numerical simulations of single and double junction solar cells based copper gallium diselenide (CGS) and copper indium gallium diselenide (CIGS) electrical characteristics are performed using a physically based two-dimensional device simulator Silvaco-Atlas. The J-V characteristics and the external quantum efficiency EQE are simulated under AM1.5 illumination. In this study, where the single CGS solar cell used as the top cell and the single CIGS solar cell used as the bottom cell in the tandem configuration show conversion efficiencies of 18.92% and 20.32%, respectively. Our simulation results of the CIGS solar cell are in good agreement with the experimental high record efficiency. The simulated photovoltaic parameters of the CGS/CIGS tandem cell are: the short-circuit current density  $J_{sc}$  of 16.35 mA/cm<sup>2</sup>, the open circuit voltage  $V_{oc}$  of 1.8 V and the fill factor FF of 85.09 % and the conversion efficiency  $\eta$  of 25.11%. In the CGS/CIGS tandem solar cell, an improvement in the conversion efficiency to 25.11% was found. The overall investigation on copper indium gallium diselenide solar cells gives potential suggestions that may lead to the fabrication of the high efficiency CGS/CIGS single and tandem solar cells.

© 2015 The Authors. Published by Elsevier Ltd. This is an open access article under the CC BY-NC-ND license (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

Peer-review under responsibility of the Euro-Mediterranean Institute for Sustainable Development (EUMISD)

*Keywords:* numerical simulation; Silvaco-Atlas; CGS solar cell; CIGS solar cell; CGS/CIGS tandem cell; efficiency.

### 1. Introduction

Thin film solar cells have the potential for low-cost and large-scale terrestrial photovoltaic applications. A number of semiconductor materials including polycrystalline CdTe, CIGS and amorphous silicon (a-Si) materials have been

\* Corresponding author. Tel.: +21333543199; fax: +21333543199.  
E-mail address: [elbarmourad@gmail.com](mailto:elbarmourad@gmail.com)

Available online at [www.sciencedirect.com](http://www.sciencedirect.com)

ScienceDirect

Solar Energy 122 (2015) 104–112

SOLAR  
ENERGY[www.elsevier.com/locate/solener](http://www.elsevier.com/locate/solener)

## Effect of top-cell CGS thickness on the performance of CGS/CIGS tandem solar cell

M. Elbar<sup>a</sup>, S. Tobbeche<sup>a,\*</sup>, A. Merazga<sup>b</sup><sup>a</sup> *Laboratoire des matériaux semiconducteurs et métalliques (LMSM), Faculté des Sciences et de la Technologie, Département de Génie-Electrique, Université de Biskra, BP 145, 07000 Biskra, Algeria*<sup>b</sup> *Physics Department, Faculty of Science, Taif University, Taif 21974, Saudi Arabia*

Received 26 June 2015; received in revised form 3 August 2015; accepted 20 August 2015

Communicated by: Associate Editor Nicola Romeo

### Abstract

The photovoltaic characteristics of a double junction CGS/CIGS tandem solar cell, based on copper gallium diselenide (CGS) and copper indium gallium diselenide (CIGS) structures as top-cell and bottom-cell respectively, were numerically simulated under AM1.5 G spectral illumination using the two-dimensional device simulator Silvaco-Atlas. The performance of single CGS and CIGS solar cells with fixed thicknesses at 0.26  $\mu\text{m}$  and 3.5  $\mu\text{m}$ , respectively, were simulated first. They present conversion efficiencies of 18.92% and 20.32% respectively, in good agreement with experimental high record efficiencies found in literature. Maintaining the thickness of the bottom CIGS cell at 3.5  $\mu\text{m}$ , the top-cell CGS thickness dependence of the tandem cell performance is then investigated within the range from 0.10  $\mu\text{m}$  to 0.28  $\mu\text{m}$ . The optimal thickness corresponding to maximum conversion efficiency of 26.21% is 0.19  $\mu\text{m}$ . This thickness of the top-cell coincides well with the point of “current matching” where the short-circuit current densities of the top, bottom and tandem cells are exactly equal to one another and equal to 18.06  $\text{mA}/\text{cm}^2$ , which is also maximum short-circuit current density of the tandem cell at the optimal top-cell thickness 0.19  $\mu\text{m}$ . Thickness dependent light absorption of the top-cell CGS layer is the main reason for this efficiency improvement.

© 2015 Elsevier Ltd. All rights reserved.

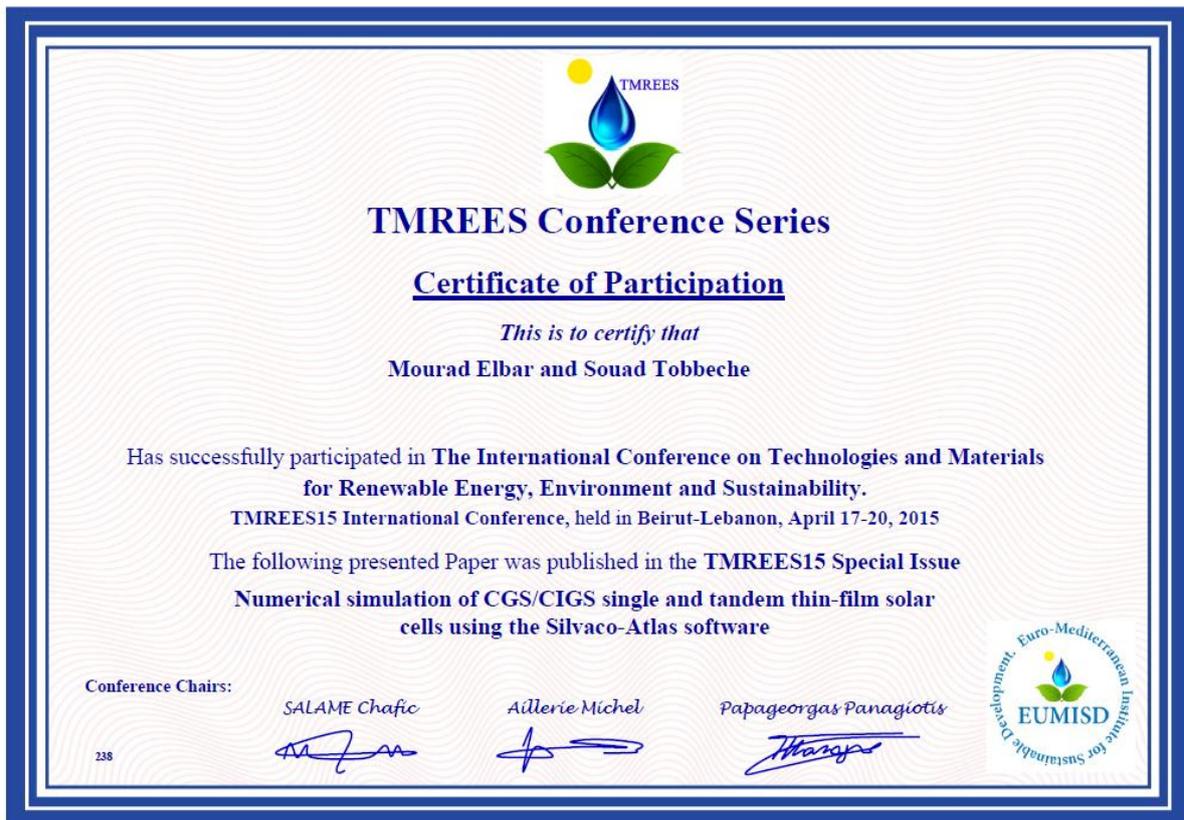
**Keywords:** CGS solar cell; CIGS solar cell; CGS/CIGS tandem solar cell; CGS thickness; Current matching

### 1. Introduction

Thin-film solar cells have the potential for low-cost and large-scale photovoltaic applications. A number of semiconductor materials, such as amorphous silicon (a-Si:H), polycrystalline cadmium telluride (CdTe) and copper indium gallium diselenide (CIGS) for example, have been used for thin-film photovoltaic solar cells. The CIGS compound material is a semiconductor with a suitable energy

band-gap of high optical absorption coefficient in the visible spectrum of sunlight. The absorption coefficient of CIGS film in the visible spectrum is, in fact, 100 times higher than that of the silicon film. Furthermore, the CIGS thin-film solar cell exhibits an excellent outdoor stability and radiation hardness and achieves the highest conversion efficiency compared to other chalcopyrite and compared to CdTe and a-Si:H thin-film solar cells. A single-junction thin-film CIGS solar cell with an active area of 0.5  $\text{cm}^2$  exhibited the highest efficiency of 20.3% at the “Centre of Solar Energy and Hydrogen Research Baden-Württemberg” (ZSW) (Jackson et al., 2011) and 19.9% at

\* Corresponding author. Tel.: +213 7 96 55 85 09.  
E-mail address: [souad\\_tobbeche@yahoo.fr](mailto:souad_tobbeche@yahoo.fr) (S. Tobbeche).







République Algérienne Démocratique et Populaire  
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique  
Université Mohamed Khider – Biskra  
Faculté des Sciences et de la technologie  
Département Génie électrique

**Thèse Doctorat LMD en Electronique**  
**Spécialité: Micro-électronique**

**Présenté par :** ELBAR Mourad

**Encadré par :** Pr. TOBBECHE Souad

THEME

**Etude par Simulation Numérique d'une Cellule Solaire en CIGS à Multi-jonction par le Logiciel Tcad Silvaco**

Résumé

Les cellules solaires en couches minces par "Copper Indium Gallium Selenide" ( $\text{CuIn}_{(1-x)}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ ) attirent plus d'attention récemment dans l'industrie photovoltaïque. Les cellules solaires de CIGS simple jonction constituées par des couches ayant différents gaps d'énergie de 1.2 à 1.3 eV ont atteint un rendement de conversion record de 20.1 %. Une augmentation et amélioration de ce rendement est prévue principalement en utilisant des cellules solaires double jonction (dénommées tandem) afin d'exploiter tout le spectre solaire, ceci est le but de notre travail. Pour cela, une étude de simulation et de conception d'une cellule solaire en CIGS à double jonction sera effectuée. L'outil de modélisation et de simulation est le logiciel Tcad Silvaco à 2D adapté à l'étude des performances des cellules solaires à base de CIGS simple et double jonction.

Dans un premier temps, nous avons étudié les caractéristiques électriques d'une cellule solaire en couches minces et à hétérojonction à base de  $\text{ZnO}/\text{CdS}(\text{n})/\text{CIGS}(\text{p})/\text{Mo}$  et  $\text{ZnO}/\text{CdS}(\text{n})/\text{CGS}(\text{p})/\text{Mo}$  simple jonction avec épaisseurs fixes des absorbeurs (CIGS, CGS) de  $3.5\mu\text{m}$  et  $0.26\mu\text{m}$ , respectivement. Les caractéristiques électriques de la densité de courant en fonction de la tension  $J(V)$  sous éclairement AM1.5 sont simulées : les rendements de conversion obtenus sont 20.32 % et 18.92%, respectivement. Ces résultats de simulation sont en très bon accord avec ceux trouvés expérimentalement et par simulation existants dans la littérature. Puis dans un deuxième temps, nous avons étudié la cellule solaire tandem en CGS/CIGS, les résultats de la simulation sont : le rendement de conversion  $\eta = 25.11\%$ , la tension en circuit ouvert  $V_{co} = 1.8\text{ V}$ , la densité du courant de court-circuit  $J_{cc} = 16.35\text{ mA/cm}^2$  et le facteur de forme  $FF = 85.09\%$ . Le rendement simulé de 25.11% obtenue pour la cellule tandem (CGS/CIGS) non optimisée est meilleur que celui reporté dans la littérature et obtenu en utilisant les deux logiciels Silvaco-Atlas et AMPS-1D. Ensuite, l'épaisseur de la cellule inférieure en CIGS étant fixée à  $3.5\mu\text{m}$  nous avons varié l'épaisseur de la cellule supérieure en CGS de  $0.1\mu\text{m}$  à  $0.28\mu\text{m}$  dans la cellule tandem (CGS/CIGS). L'épaisseur optimale correspondante à un rendement de conversion maximal de 26.21 % est de  $0.19\mu\text{m}$ . Cette valeur assure la condition d'égalité des courants de court-circuit de la cellule solaire supérieure en CGS et la cellule solaire inférieure en CIGS se trouvant dans la cellule solaire tandem en (CGS/CIGS).

Enfin, nous avons étudié l'effet de la température sur les caractéristiques de la cellule solaire tandem optimisée dans l'intervalle de température 300-400 K. A partir des résultats de simulation, nous avons constaté une petite augmentation de la densité de courant de court-circuit, et une diminution linéairement des caractéristiques photovoltaïques (la tension en circuit ouvert, le facteur de forme FF et le rendement de conversion  $\eta$ ) des cellules solaires (supérieure, inférieure, tandem) avec l'augmentation de la température.

**Mots clés:** Modélisation, Cellule solaire, Tandem, CIGS, CGS, Rendement, Température, Tcad Silvaco.