



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

**UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID - TLEMCCEN**

# MÉMOIRE

Présenté à :

FACULTÉ DES SCIENCES – DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

**MASTER EN PHYSIQUE**

Spécialité : Physique Énergétique et Énergies Renouvelables

Par :

**Mr DJELAD ZAKARIA**

Sur le thème :

---

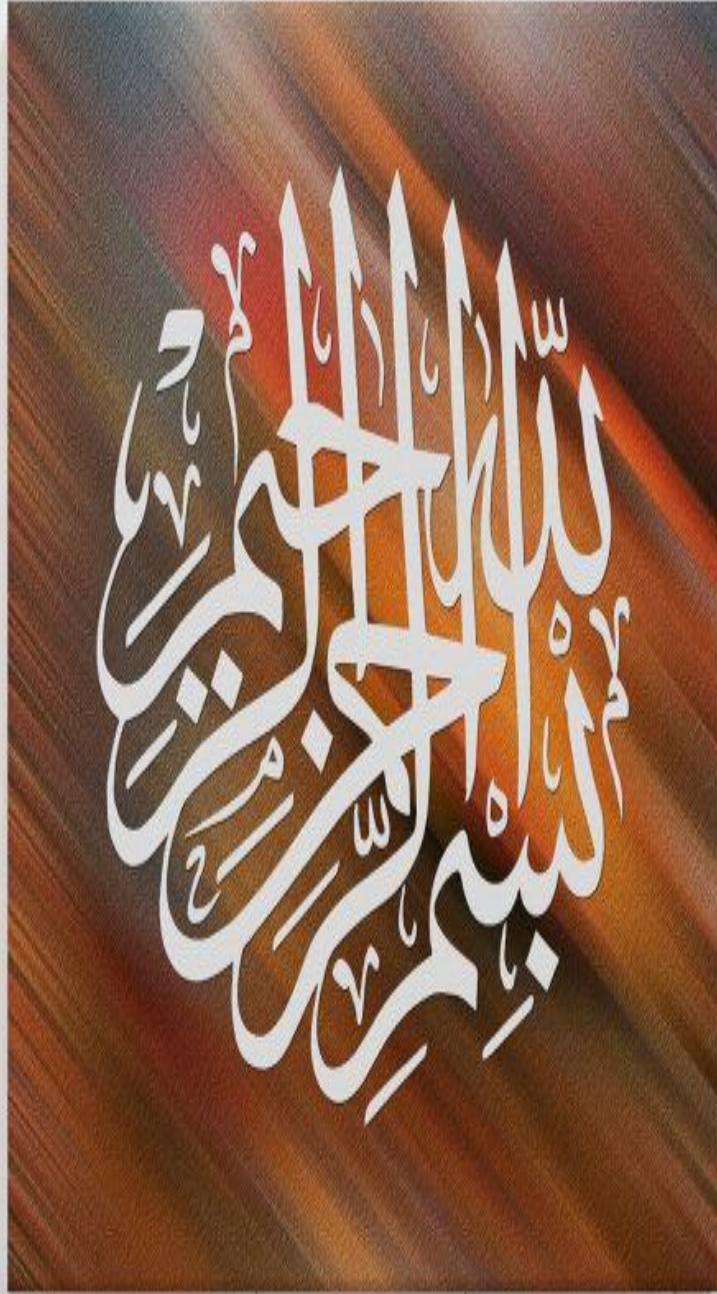
## **Optimisation de l'efficacité des cellules solaires à base de $\text{CuInSe}_2$ , modélisation et simulation**

---

Soutenu publiquement le 12 Juillet 2021 à Tlemcen devant le jury composé de :

M <sup>me</sup> RAHMOUNE Khadidja	Professeur	Université de Tlemcen	Présidente
M <sup>r</sup> BENMOUSSAT Nasreddine	Professeur	Université de Tlemcen	Examineur
M <sup>r</sup> FEROUANI Abdelmadjid	Docteur	A.M.C TIPAZA	Examineur
M <sup>me</sup> BENABADJI Batoul	Docteur	Université de Tlemcen	Encadreur

*Année Universitaire : 2020 ~ 2021*



# *Remerciements*

---

*Avant tout, je remercie Allah le tout puissant qui nous  
a donné la force, la volonté et le courage  
pour réaliser ce modeste travail.*

*Je remercie mon encadreur Dr BENABADJI BATOUL,  
enseignante à l'Université de Tlemcen  
pour l'encadrement qu'elle m'a assuré.*

*J'exprime ma profonde et respectueuse gratitude à Madame RAHMOUN KHADIDJA  
qui m'a fait l'honneur de présider le jury de ce mémoire.*

*Je remercie les membres de jury qui ont accepté d'examiner ce travail, à savoir  
Professeur N.BENMOUSSAT et Docteur A.FEROUANI*

*Merci à tous !*

# *Dédicaces*

Je dédie ce travail :

- Aux êtres les plus chers à mon cœur, mon père et ma mère, qui m'ont beaucoup soutenu durant mon cursus et à qui je serai éternellement reconnaissant.

# *Table des matières*

Remerciements	iii
Dédicaces	iv
Table de matières	v
Liste des figures	viii
Liste des tableaux	x
Liste des notations	xi
<b>Introduction générale</b>	<b>1</b>
<b>Chapitre I : Généralités sur les cellules solaires</b>	
I.1 Le rayonnement solaire et le photovoltaïque	6
I.2 L'effet photovoltaïque	7
I.2.1 Historique sur l'effet photovoltaïque	7
I.2.2 Principe de l'effet photovoltaïque	7
I.3 Différents types de filières technologiques des cellules photovoltaïque	8
I.3.1 La filière du silicium	9
I.3.1.1 Le silicium monocristallin	10
I.3.1.2 Le silicium multi cristallin	10
I.3.1.3 Silicium polycristallin	10
I.3.2 Les cellules solaires 1ères génération	11
I.3.3 Les cellules solaires 2 <sup>ème</sup> génération : La filière couches minces	12
I.3.4 Les cellules organiques	12
I.3.5 Les cellules solaires 3 <sup>ème</sup> génération	13
I.4 Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque	14
I.4.1 L'interaction photon/semi-conducteur	14
I.4.2 Les constituants de base d'une cellule solaire	14
I.4.3 Fonctionnement d'une cellule solaire	15
I.4.4 Modélisation électrique	16
I.4.5 Réponse spectrale	18
I.4.6 Zones de fonctionnement du module photovoltaïque	18

I.5 Avantages et inconvénients du PV	19
I.6 Pertes fondamentales et technologiques limitant le rendement	20
I.6.1 Pertes fondamentales	20
I.6.2 Pertes technologiques	21
Conclusion	23
Bibliographie	24

## **Chapitre II : les cellules solaires à base de CIS**

II.1 Introduction	28
II.2 Structure de l'état solide	28
II.3 Propriétés structurales et électroniques du CIS	29
II.3.1 Structure du cristal	29
II.3.2 Importance des composés chalcopyrites	30
II.3.3 Propriétés du CIS	31
II.3.3.1 Propriétés optiques	31
II.3.3.2 Propriétés électriques de CuInSe <sub>2</sub>	32
II.3.3.3 Propriétés mécaniques	33
II.3.3.4 Propriétés thermiques	33
II.4 Défauts dans le matériau CuInSe <sub>2</sub>	33
II.4.1 Défauts intrinsèques	33
II.4.2 Défauts extrinsèques	34
II.5 Structure de la cellule CIS	34
II.5.1 Le substrat	35
II.5.2 Contact arrière	35
II.5.3 L'absorbeur	36
II.5.4 La couche tampon	36
II.5.5 La couche fenêtre	37
II.5.6 La jonction P-N	37
II.6 Le dépôt des couches minces	38

II.6.1 Le dépôt par voie physique (PVD)	38
II.6.2 Le dépôt par voie chimique (CVD)	39
Conclusion	39
Bibliographie	40

## **Chapitre III : Simulation numérique des Cellules solaires à base de CIS avec SCAPS-1D**

III.1 Introduction	43
III.2 Présentation du logiciel SCAPS	43
III.2.1 Aperçu théorique	44
III.2.1.1 Les phénomènes de transport : les modèles de dérive-diffusion	44
III.2.1.2 Photo-génération	45
III.2.1.3 Recombinaison	45
III.2.2 Le logiciel SCAPS-1D	46
III.3 Les paramètres de la cellule utilisée (ZnO/CdS/CuInSe <sub>2</sub> )	47
III.4 Rappel des grandeurs électriques d'une cellule solaire	49
III.5 Simulation, résultats et discussions	50
III.5.1 Influence de l'épaisseur de la couche absorbante CuInSe <sub>2</sub>	51
III.5.2 Influence de l'épaisseur de la couche fenêtre ZnO	52
III.5.3 Choix de l'épaisseur de la couche tampon CdS	54
III.6 Effet du dopage sur les grandeurs photovoltaïques	55
III.6.1 Effet du dopage de la couche absorbante CIS	55
III.6.2 Effet du dopage de la couche tampon	56
III.6.3 Effet du dopage de la couche fenêtre	57
III.7 La structure optimale	58
Conclusion	59
Bibliographie	60
Conclusion générale et perspectives	62
Résumé	64
Abstract	64

## Liste des figures

**Figure I.1** : L'Irradiance spectrale en fonction de la longueur d'onde : Représentation graphique des spectres AM0, AM1 et AM1.5

**Figure I.2** : L'effet photovoltaïque

**Figure I.3** : Principe de fonctionnement d'une cellule solaire

**Figure I.4** : Etat de maturité des technologies de cellules photovoltaïques

**Figure I.5** : Cellules de silicium monocristallin et multi cristallin

**Figure I.6** : Structure atomique du Silicium poly cristallin

**Figure I.7** : Cellule solaire de 2<sup>ème</sup> génération

**Figure I.8** : Schéma de principe d'une cellule organique.

**Figure I.9** : Transitions inter-bandes d'électrons dans un semi-conducteur  
a) à gap direct, b) à gap indirect

**Figure I.10** : La jonction PN d'une cellule solaire. Structure (à gauche) et diagramme de bande (à droite)

**Figure I.11** : Schéma électrique équivalent

**Figure I.12** : Caractéristique courant-tension d'une cellule solaire sous éclairnement et sous obscurité (à gauche) et représentation conventionnelle de la courbe  $I=f(V)$  (à droite)

**Figure I.13** : Caractéristiques  $I(V)$  d'une cellule et d'une association de 3 branches en parallèle ayant chacune 2 cellules en série.

**Figure I.14** : Mécanismes de recombinaison

a) Recombinaison SRH, b) recombinaison Auger, c) Recombinaison radiative

**Figure II.1** : Structure cristalline de  $\text{CuInSe}_2$

**Figure II.2** : Coefficient d'absorption de quelques matériaux utilisés pour la fabrication des cellules solaires en couches minces.



**Figure II.3 :** Exemples de défauts ponctuels simples. (a) Lacune. (b) Atome en position interstitielle. (c) Atome en position substitutionnelle.

**Figure II.4 :** Structure d'une cellule solaire à base de CIS.

**Figure II.5 :** Diagramme de bandes d'une cellule CIS/CdS/ZnO.

**Figure II.6 :** Les différentes techniques de dépôts de couches minces.

**Figure III.1 :** Fenêtre principale du logiciel SCAPS-1D.

**Figure III.2 :** la cellule solaire simulée par SCAPS.

**Figure III.3 :** Caractéristique I-V d'une cellule solaire.

**Figure III.4 :** Structure d'une cellule solaire à base de CuInSe<sub>2</sub> utilisée en simulation

**Figure III.5 :** Le rendement de la cellule pour différentes épaisseurs de la couche CIS

**Figure III.6 :** Le Rendement pour différentes épaisseurs de la couche ZnO

**Figure III.7 :** Le Rendement pour différents dopages de CIS.

**Figure III.8 :** Le Rendement pour différentes densités de dopage deCdS

## *Liste des tableaux*

**Tableau III.1** : Les paramètres de la cellule simulée ZnO/CdS/CuInSe<sub>2</sub>.

**Tableau III.2** : Paramètres électriques pour différentes épaisseurs de la couche CuInSe<sub>2</sub>.

**Tableau III.3** : Paramètres électriques pour différentes épaisseurs de la couche ZnO.

**Tableau III.4** : Paramètres électriques pour différentes densités de dopage de la couche CIS.

**Tableau III.5** : Paramètres électriques pour différentes densités de dopage de la couche CdS

**Tableau III.6** : Paramètres électriques pour différentes densités de dopage de la couche ZnO

**Tableau III.7** : Structure optimale

## Liste des Notations

<b>AM</b>	<b>Air Mass</b>
<b>PV</b>	<b>Photovoltaïque</b>
<b>SC</b>	<b>Semi-conducteur</b>
<b>CdTe</b>	<b>Tellurure de Cadmium</b>
<b>CIS</b>	<b>Hétéro jonction de diséléniure cuivre indium</b>
<b>TCO</b>	<b>Transparent Conducting Oxides</b>
<b>ITO</b>	<b>Oxyde d'Etain dopé Indium</b>
<b>ZnO</b>	<b>Oxyde de zinc</b>
<b>PVD</b>	<b>Physique en phase vapeur</b>
<b>CVD</b>	<b>Chimique en phase vapeur</b>
<b>CIGS</b>	<b>Cuivre, indium, gallium et sélénium</b>
<b>V<sub>co</sub></b>	<b>La tension en circuit ouvert</b>
<b>R<sub>c</sub></b>	<b>Résistance de la charge connectée à la cellule.</b>
<b>I<sub>cc</sub></b>	<b>Courant de court-circuit</b>
<b>R<sub>s</sub></b>	<b>La résistance série</b>
<b>R<sub>p</sub></b>	<b>Résistance shunt ou parallèle</b>
<b>n</b>	<b>Facteur d'idéalité de la diode</b>
<b>FF</b>	<b>Facteur de forme</b>
<b>η</b>	<b>Le rendement ou efficacité</b>
<b>ZCE</b>	<b>Zone de charge d'espace</b>
<b>SCAPS</b>	<b>Solar Cell Capacitance Simulator</b>

# *Introduction générale*

### **Introduction générale**

Au rythme de la consommation actuelle, l'épuisement des énergies fossiles n'est qu'une question de temps. Cela rend nécessaire la nécessité de développer les sources d'énergies renouvelables, afin de substituer les énergies conventionnelles. Les énergies renouvelables sont des modes de production d'énergie utilisant des forces ou des ressources dont les approvisionnements sont illimités comme : l'eau des rivières, le vent, les végétaux et le soleil. Il existe plusieurs types d'énergie. On peut citer à titre d'exemples : l'énergie éolienne, l'énergie hydraulique, la biomasse, la géothermie, l'énergie du bois et l'énergie solaire. En raison de son abondance, cette dernière est en train de devenir l'une des principales sources d'énergie. La conversion directe de l'énergie lumineuse issue du soleil en énergie électrique est faite au moyen de cellules photovoltaïques (également appelées cellules solaires). [1]

Les semi-conducteurs entrant dans la fabrication de ces cellules solaires sont l'objet de multiples recherches. Jusqu'à présent, le silicium est le matériau le plus couramment utilisé pour la fabrication des cellules photovoltaïques, plus de 80% de la production mondiale [1]. En raison de sa méthode de production très énergivore et très coûteuse, d'autres matériaux apparaissent comme compétitifs au silicium, parmi eux, les semi-conducteurs à structure chalcopyrite, à base de CIS (Cu (In, Ga, Al) (Se,S)<sub>2</sub>). En effet, ces composés ont des largeurs de bande entre 1eV (CuInSe<sub>2</sub>) et 3eV (CuAlS<sub>2</sub>), ce qui leur permet d'absorber la majeure partie du rayonnement solaire avec des épaisseurs très réduites (moins de 10µm). De plus, ces matériaux sont aujourd'hui ceux qui permettent d'atteindre les plus hauts rendements de conversion photovoltaïque à partir de dispositifs en couches minces [2], en particulier le Cu (In, Ga) Se<sub>2</sub> qui est considéré comme le plus efficace parmi tous les dérivés à base de CIS [3].

Notre travail concerne les cellules solaires en couches minces utilisant le di séléniure de cuivre et d'indium CuInSe<sub>2</sub>, qui représentent l'approche la plus prometteuse au plan de réduction des coûts de production. L'avantage de ce matériau est son élaboration facile d'une part et son haut rendement d'autre part par rapport aux cellules solaires conventionnelles au silicium cristallin. Les caractéristiques de cette cellule avec les propriétés des différents matériaux constituant ce type de cellule et la technologie de fabrication vise à améliorer les performances de la cellule et augmenter ainsi son efficacité. L'objectif de ce présent mémoire est de faire une modélisation d'une cellule solaire en couche mince de structure P-N à base de

CuInSe<sub>2</sub> en vue d'optimiser par simulation les caractéristiques physiques et géométriques des différentes couches de la cellule. Ce travail est articulé comme suit :

- Dans le premier chapitre : on fait un rappel des différentes notions sur l'énergie solaire, l'effet photovoltaïque, les générations des cellules solaires ainsi que leurs fonctionnements et leurs limitations.
- Le deuxième chapitre est consacré aux cellules solaires en couches minces à base de CuInSe<sub>2</sub> où les principaux éléments qui les constituent sont exposés afin de comprendre le principe de base du fonctionnement de tels dispositifs photovoltaïques.
- Dans le troisième chapitre, nous présentons d'abord le logiciel de simulation utilisé à savoir SCAPS-1D et nous présenterons et discuterons les résultats obtenus par simulation.
- On terminera par une conclusion générale et des perspectives.

**Bibliographie**

- [1] T. Nakada, A. Kunioka, Applied Physics Letters 72, 2444 (1999).
- [2] D. Liao, A. Rockett, Journal of Applied Physics 93, 9380 (2003).
- [3] B. L. Lara, A. M. Fernández,.The fifth International Renewable Energy Conference IEEE. Hammamet, Murch 2014

*Chapitre I*

*Généralités sur les cellules  
solaires*



## I.1 Le rayonnement solaire et le photovoltaïque

On ne peut parler de cellule solaire et d'effet photovoltaïque sans parler d'abord de la source d'énergie « inépuisable » utilisée qu'est le soleil. Ce dernier apparaît comme un corps noir à la température  $T=5800\text{K}$  [4] ; ce qui conduit à un pic d'émission situé à une longueur d'onde de  $520\text{nm}$  pour une puissance de  $60\text{MW}/\text{m}^2$ . Si on tient compte de la distance entre la terre et le soleil qui est de  $149597870\text{ km}$ , alors l'éclairement moyen annuel est de  $1367\text{W}/\text{m}^2$  hors atmosphère [5]. Pour une comparaison efficace des performances des cellules solaires fabriquées par les différents laboratoires, il a été établi la notion d'Air Mass (AM) qui représente la puissance absorbée par l'atmosphère en fonction de l'angle  $\theta$  du soleil par rapport au zénith.

$$AM = \frac{1}{\cos\theta} \quad \text{I.1}$$

AM1.5G (G pour « global ») est le plus utilisé et le plus étudié car il tient compte des radiations diffuses et directes. AM1.5G correspond à une irradiance de  $970\text{W}/\text{m}^2$  ajustée à  $1\text{KW}/\text{m}^2$ .

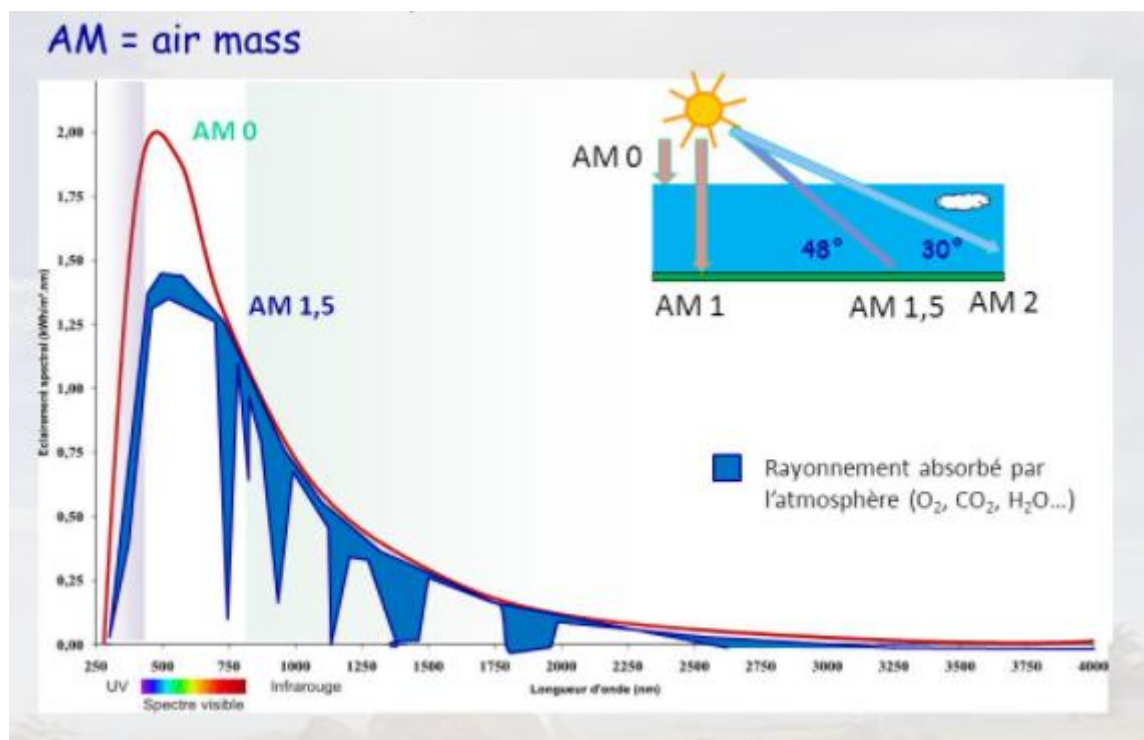


Figure I.1 : L'Irradiance spectrale en fonction de la longueur d'onde.

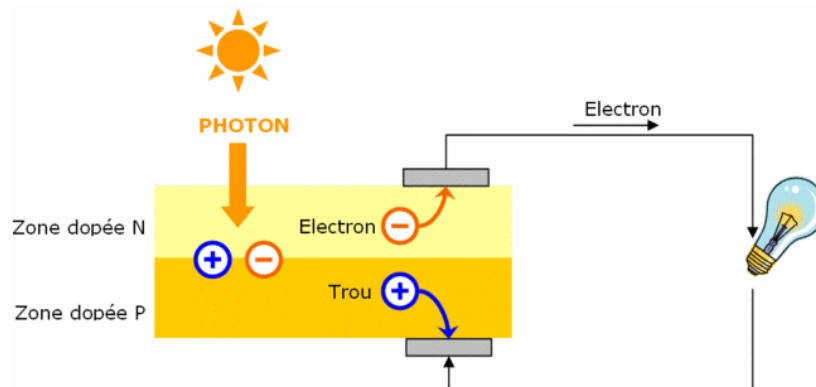
Représentation graphique des spectres AM0, AM1 et AM1.5. [6]

De la figure ci-dessus, ressort que la majeure partie du spectre solaire à la surface de la terre a trait au domaine du visible et du proche infrarouge.

## **I.2 L'effet photovoltaïque**

### **I.2.1 Historique sur l'effet photovoltaïque**

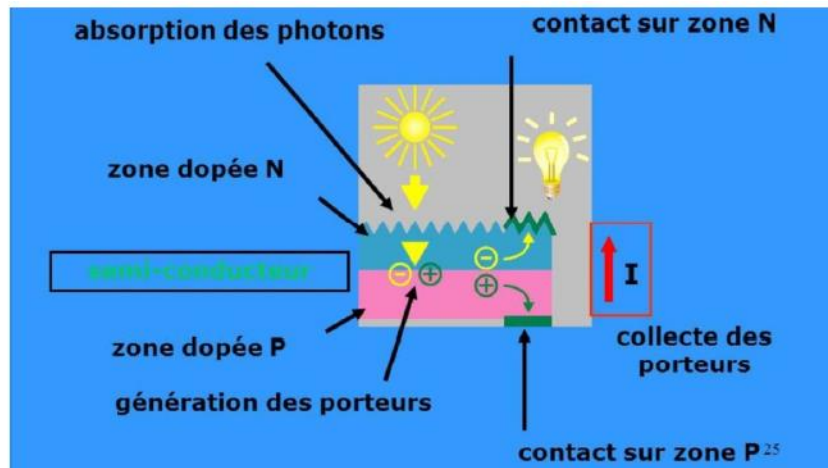
L'effet photovoltaïque a été découvert en 1839 par E. Becquerel qui mit en évidence la propriété qu'ont certains matériaux de convertir directement la lumière en courant électrique. Il découvre l'effet photovoltaïque qui correspond à l'apparition d'une tension aux bornes d'un matériau semi-conducteur exposé à la lumière. En 1912, Albert Einstein établit les bases théoriques du photovoltaïque. Il postula que la lumière entrant dans ce type de matériaux était à l'origine de collisions entre les photons et les atomes, provoquant ainsi l'expulsion des électrons de leurs orbites et créant ainsi un courant électrique. [7]



**Figure I.2** : L'effet photovoltaïque : schéma simpliste [8]

### **I.2.2 Principe de l'effet photovoltaïque**

L'effet photovoltaïque utilisé dans les cellules solaires permet de convertir directement l'énergie lumineuse des rayons solaires en électricité (**figure I.3**) par le biais de la production et du transport dans un matériau semi-conducteur de charges électriques positives et négatives sous l'effet de la lumière [10].



**Figure I.3** : Principe de fonctionnement d'une cellule solaire [10].

L'effet photovoltaïque repose sur trois principes dont l'action quasi simultanée engendre la transformation directe d'une énergie électromagnétique (rayonnement) en énergie électrique de type continu utilisable [11] à savoir :

- L'absorption de photons dont l'énergie est supérieure au gap
- La conversion de l'énergie absorbée en charges électriques libres qui correspond à la création de paires électrons/trous dans le semi-conducteur
- La collecte de ces particules dans un circuit électrique extérieur

Un dispositif photovoltaïque doit donc contenir :

- Un matériau absorbant dans la gamme du spectre solaire et possédant au moins une transition possible entre deux niveaux d'énergie
- Une structure de collecte (de très faible résistance électrique) : électrodes de collecte ou grilles placées en face avant et arrière. [11]

### **I.3 Différents types de filières technologiques des cellules photovoltaïques**

Les technologies cristallines à base de silicium (multi cristallin et monocristallin) sont de loin les plus utilisées aujourd'hui mais les technologies "couches minces", en particulier CIS et CdTe se développent de plus en plus sur le marché. D'autres filières basées sur l'utilisation de colorants ou de matériaux organiques, promettent un bel avenir à l'énergie photovoltaïque. [12]

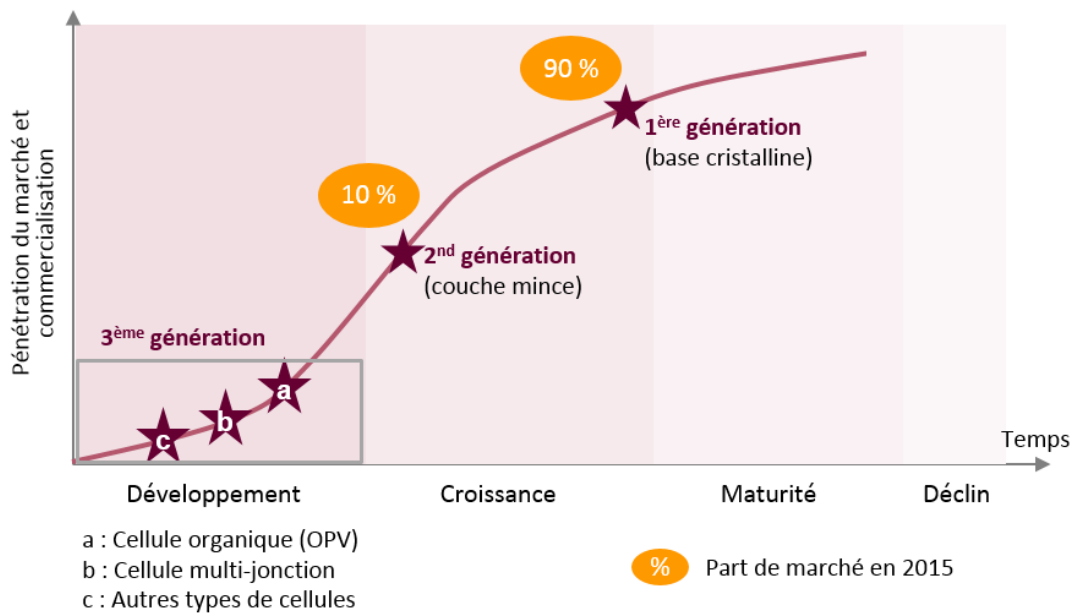


Figure I.4 : Etat de maturité des technologies de cellules photovoltaïques [12]

### I.3.1 La filière du silicium

C'est la principale industrie. Le silicium est l'élément le plus abondant de la croûte terrestre après l'oxygène. Son avantage est qu'il peut être associé avec un composant de ressources naturelles, tels que la silice, le granit, le sable et le grès. [13]

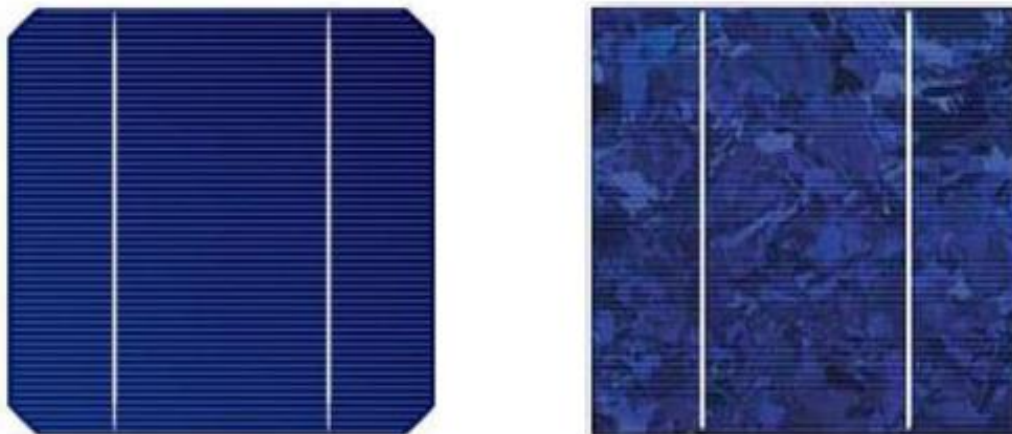


Figure I.5 : Cellules de silicium monocristallin et multi cristallin. [13]

Afin d'améliorer les performances, plus d'un demi-siècle de recherche ont été réalisées : la première cellule solaire en silicium a été fabriquée chez Bell Laboratoires aux États-Unis en

1954 avec un rendement de 6% [13]. La matrice à base de silicium cristallin comprend du silicium monocristallin et polycristallin.

### **I.3.1.1 Le silicium monocristallin**

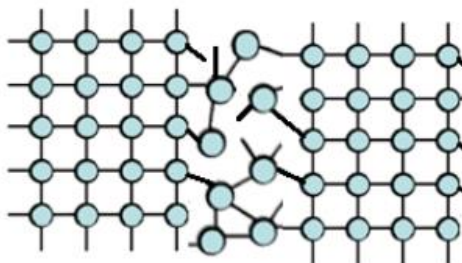
Il est obtenu par croissance ou tirage d'un lingot cylindrique à partir d'un monocristal « souche » selon le procédé Czochralski (CZ). Les cellules à base de Si monocristallin ont un bon rendement mais la méthode de production est laborieuse et coûteuse. [14]

### **I.3.1.2 Le silicium multi cristallin**

Il est obtenu par coulage en lingotière dans laquelle s'opère un refroidissement lent, de l'ordre de quelques dizaines d'heures. Sa mise au point est moins énergivore. C'est un matériau moins pur. Par comparaison entre les deux, on trouve que la cellule de silicium monocristallin a un rendement de conversion des cellules légèrement supérieur à celui du multi cristallin, mais le coût est élevé pour le premier par rapport au deuxième et le plus utilisé est le mc-Si multi cristallin [14].

### **I.3.1.3 Silicium poly cristallin**

Le silicium poly cristallin est une structure intermédiaire entre deux états extrêmes qui sont l'état cristallin et l'état amorphe. Le silicium poly cristallin peut être obtenu directement à partir d'un dépôt chimique en phase vapeur (CVD) ou par cristallisation d'une couche déposée amorphe. Il est constitué de grains monocristallins séparés entre eux par des interfaces, appelées joints de grains. [14]



**Figure I.6 :** Structure atomique du Silicium poly cristallin [14].

### I.3.2 Les cellules solaires 1<sup>ère</sup> génération

Plus de 90% des applications de l'industrie photovoltaïque [2] utilisent du silicium comme matériau de base. Ce semi-conducteur présente de nombreux avantages :

- extrait du sable, il est très abondant à la surface de la terre ;
- sa toxicité est moindre par rapport à certains semi-conducteurs III-V comme c'est le cas du Cadmium.
- il possède un oxyde naturel ( $\text{SiO}_2$ ) avec d'excellentes propriétés électroniques.
- facile à doper (dopage au phosphore ou au bore).

Son seul inconvénient est son gap indirect de 1,1 eV. Cela conduit à une absorption de rayonnement inférieure par rapport aux matériaux à gap direct : pour absorber 90% du spectre solaire, une épaisseur de 100  $\mu\text{m}$  doit être utilisée pour le silicium, et seulement 1  $\mu\text{m}$  de GaAs est suffisant. De plus, la largeur de la bande interdite du silicium fait qu'il ne soit pas le matériau le plus approprié pour capter le maximum de rayonnements du spectre solaire (entre 1 et 1,7 eV). Le GaAs, avec sa largeur de bande interdite de 1,38 eV permet d'atteindre des rendements théoriques plus élevés.

Le silicium reste cependant le matériau le plus utilisé dans le photovoltaïque. Outre ses avantages précités, il bénéficie d'une implantation importante et durable dans l'industrie de la microélectronique. Celle-ci utilise du silicium monocristallin de très haute pureté, obtenu par des méthodes telles que le tirage CZ (Czochralski) [14]. Ce type de matériau, qui présente d'excellentes qualités électroniques, est très coûteux. La part de silicium monocristallin y est plus importante, puisque les modules produits selon cette technologie ont un rendement plus élevé que ceux en silicium multi cristallin.

Le silicium poly cristallin est fabriqué à partir de matériaux moins raffinés, mais il convient aux procédés de l'industrie photovoltaïque : il représente 56,4% des modules fabriqués en 2003 [2]. La plupart de ce matériau est produit par un processus de solidification unidirectionnel, tel que Polix (Photowatt) ou Baysix® (Bayer). Par rapport à d'autres procédés, c'est le matériau qui conduit au coût le plus bas par  $\text{Wc}$  (le coût d'un module en silicium monocristallin est de 2,12 \$ US /  $\text{Wc}$ , et un module de silicium monocristallin est de 2,43 \$ US /  $\text{Wc}$ ) [15]. D'autres méthodes de production sont en cours de développement, comme le ruban de silicium EFG (Fed Growth with Edge Defined Film), produit directement sous forme de plaques minces, mais dont le taux de conversion est inférieur à celui des lingots traditionnels [16].

### I.3.3 Les cellules solaires 2<sup>ème</sup> génération : La filière couches minces

Les nouvelles cellules photovoltaïques qui constituent la deuxième génération de cellules sont composées de très peu voir pas de silicium du tout. Cela s'explique par l'augmentation du prix de ce matériau pourtant abondant sur la terre. De plus, ces cellules sont réputées car leurs épaisseurs ont été réduites considérablement, ce qui explique la facilité des constructeurs et des industriels à créer des panneaux photovoltaïques très souples, légers et faciles à installer. C'est pour cela que l'on appelle ces cellules des cellules à couches minces. [17]

Ainsi, les cellules de deuxième génération sont plus pratiques, mais elles fonctionnent toujours avec le même principe que des cellules cristallines. On peut donc énumérer plusieurs matériaux différents dans cette nouvelle génération tels que le silicium amorphe (substance minérale non cristallisée, c'est à dire ne possédant pas de structure atomique ordonnée), le cuivre, le gallium, le sélénium, le zinc. Par exemple : CIGS (cuivre, indium, gallium et sélénium), cellule dépourvue de toxicité pour l'environnement. [17]



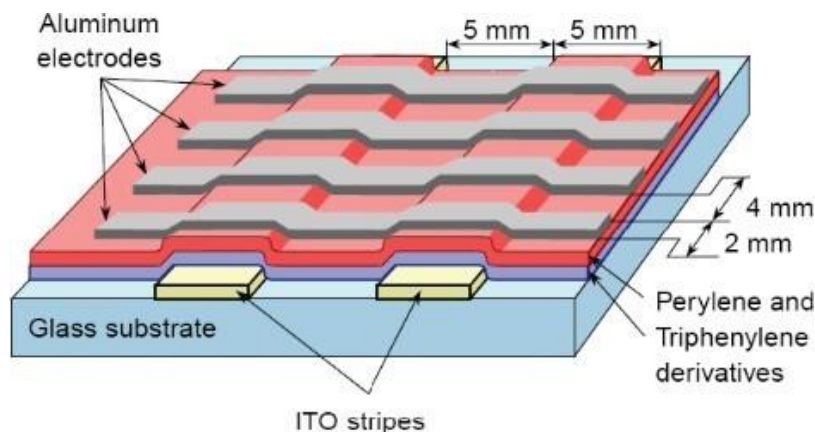
**Figure I.7** : Cellule solaire de 2<sup>ème</sup> génération [17].

### I.3.4 Les cellules organiques

La conception des cellules solaires à base de matériaux organiques ou de polymères est justifiée par les avantages que présentent ces matériaux à savoir :

- leur faible coût,
- la matière première illimitée,
- la facilité de mise en œuvre,
- des technologies basse température
- des dispositifs souples.

Les cellules organiques connaissent un développement rapide et leurs rendements de conversion ont franchi récemment la barre des 8% [18]. Un exemple de cellule organique est représenté sur la **Figure I.8**.



**Figure I.8** : Schéma de principe d'une cellule organique. [18]

### I.3.5 Les cellules solaires 3<sup>ème</sup> génération

Les cellules de 3<sup>ème</sup> génération sont plus souples, ultrafines, et donc plus « agiles » que les panneaux en silicium. Ils pourraient équiper –dans un futur proche- les toits des trains et des voitures, les stores, ou encore les tentes militaires. Ils peuvent être transparents ou colorés et pourraient être intégrés aux façades des immeubles sous forme de fines couches de plastique [19]. Les objets du quotidien pourraient eux aussi en être dotés, du parasol au sac à dos, en passant par les vêtements.

La troisième génération vise à passer la limite maximale de rendement des cellules actuelles, qui est d'environ 30% (aux laboratoires) [20]. Plusieurs concepts sont envisagés pour atteindre cet objectif :

- Superposition de plusieurs cellules (utilisant des bandes d'énergie différentes).
- Cellules à concentration.
- Utilisation de photons à basse énergie qui ne sont habituellement pas absorbés par la cellule.
- Cellules à électrons chauds produisant plus de paires électron/trou.
- Conversion des photons pour ajuster le spectre de la lumière solaire aux caractéristiques du semi-conducteur. [20]



## I.4 Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque

### I.4.1 L'interaction photon/semi-conducteur

L'écart entre les bandes de valence et de conduction, ou gap, représente une caractéristique fondamentale des semi-conducteurs. La figure I.9 présente les différentes transitions possibles selon la nature du gap. Quand le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence coïncident dans l'espace des  $k$ , il s'agit d'un gap direct. (figure I.9 (a)). Les transitions inter bandes s'effectuent verticalement, ceci illustre le fonctionnement des semi-conducteurs binaires III-V, tels que le GaAs, beaucoup utilisé en optoélectronique. Dans le cas du silicium, le gap est indirect. [21] Les transitions électroniques entre les extrema des bandes sont obliques, donc non radiatives puisqu'elles impliquent un changement du vecteur d'onde de l'électron. Les électrons du sommet de la bande de valence peuvent toutefois être directement excités vers le minimum relatif central de la bande de conduction grâce à un photon de plus grande énergie. Pour que la transition s'effectue dans le gap indirect, il faut qu'un phonon soit au préalable absorbé (ou émis) par l'électron, afin que le vecteur d'onde de ce dernier corresponde au maximum de la bande de valence, pour absorber un photon (figure I.9 (b)). [21]

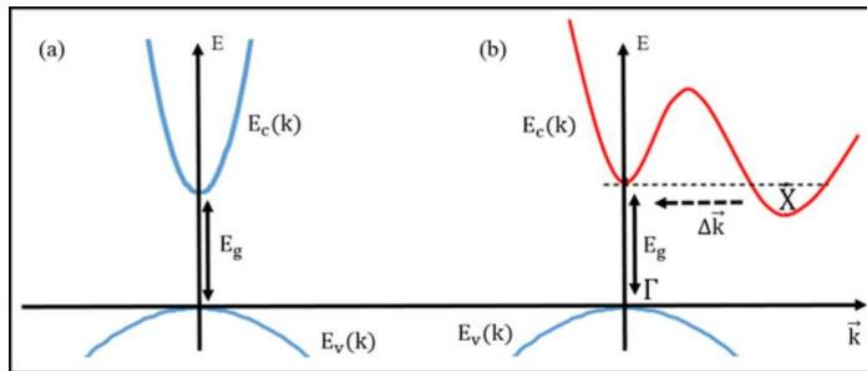


Figure I.9 : Transitions inter-bandes d'électrons dans un semi-conducteur.  
a) à gap direct, b) à gap indirect [21]

### I.4.2 Les constituants de base d'une cellule solaire

La conception des cellules solaires nécessite de définir ses paramètres afin de maximiser son efficacité, et ceci en tenant compte d'un certain nombre de contraintes. Ces dernières sont définies par l'environnement de travail dans lequel les cellules solaires sont produites. Par

exemple, dans un environnement commercial où l'objectif est de produire une cellule solaire à prix concurrentiel, le coût de fabrication doit être pris en compte. Par contre, dans un environnement de recherche (au laboratoire), dont l'objectif est de produire une cellule solaire très performante, l'efficacité plutôt que le coût, est la principale considération. Les caractéristiques de base des composants d'une cellule photovoltaïque sont les mêmes, bien que différentes structures soient envisageables pour l'élaboration des cellules solaires. [19]

Une cellule solaire se compose d'une diode avec une jonction n+ p peu profonde (à environ  $0.3\mu\text{m}$  de la surface) pour une épaisseur moyenne allant de  $200$  à  $250\mu\text{m}$ . (Figure I-10) La partie gauche du semi-conducteur dopée n+ est appelée émetteur et la partie située à droite de la zone de charge d'espace (ZCE) est appelée base [19]. Afin de réduire les pertes par réflexion, une couche antireflet est déposée sur la face avant de la cellule [15]. Enfin, le courant électrique est collecté au moyen de contacts en face avant et arrière. Ces contacts n'occupent qu'une faible partie de la surface éclairée. Par contre, ceux de la surface arrière recouvrent toute la surface [5].

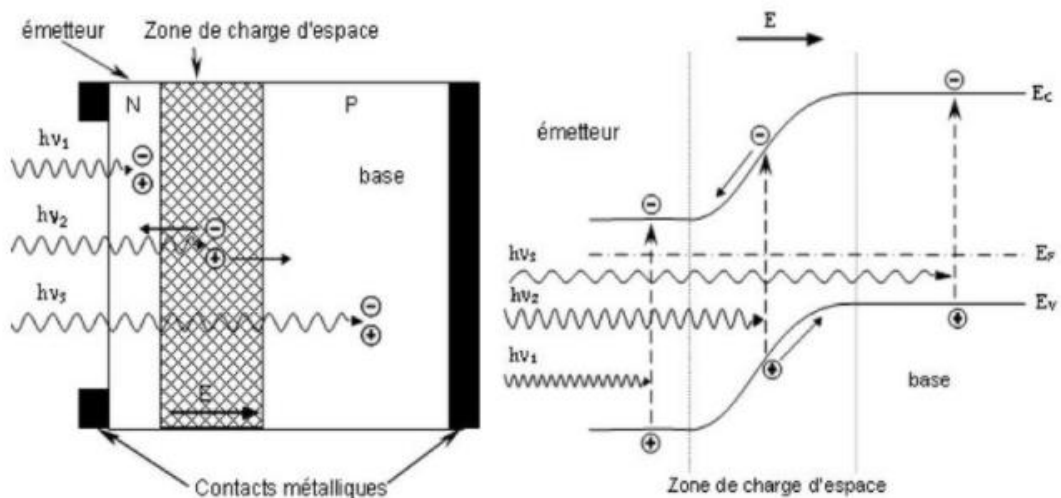


Figure I.10 : La jonction PN d'une cellule solaire.

Structure (à gauche) et diagramme de bande (à droite) [31]

### I.4.3 Fonctionnement d'une cellule solaire

Les photons incidents créent des porteurs dans les zones n et p et dans la ZCE. Selon les régions, les photos porteurs auront une action différente :

- Dans la zone n ou p, les porteurs minoritaires qui atteignent la ZCE sont renvoyés par le champ électrique dans la zone p (pour les trous) ou dans la zone n (pour les électrons) où ils seront majoritaires ; on aura un photo courant de diffusion. [5], [15],[31]

- Dans la ZCE, les paires électron/trou créées par les photons incidents sont dissociées par le champ électrique : les électrons vont aller vers la région n et les trous vers la région p ; on aura un courant de génération-recombinaison [5], [15]. Ces deux contributions s'ajoutent pour donner un photo courant résultant  $I_{ph}$  : c'est un courant de porteurs minoritaires, proportionnel à l'intensité lumineuse. [31]

### I.4.4 Modélisation électrique

Le fonctionnement d'une cellule solaire peut être modélisé par le schéma électrique équivalent ci-dessous comprenant une source de courant et deux diodes en parallèle [28]

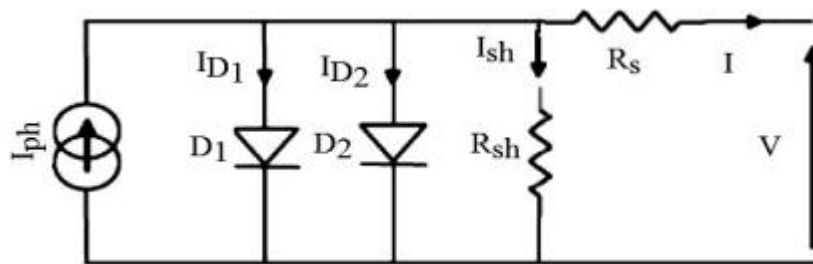


Figure I.11 : Schéma électrique équivalent [22]

- La source de courant  $I_{ph}$  modélise le courant photo généré,  $I_{D1}$  et  $I_{D2}$  représentent respectivement le courant de diffusion dans la base et l'émetteur et le courant de génération-recombinaison dans la ZCE de la jonction p/n [5], [23]
- La résistance série  $R_s$  modélise les pertes résistives dues à la résistivité des différentes couches de la cellule : émetteur, base et contacts métalliques (en particulier leur interface avec le semi-conducteur). Ce terme doit être le plus faible possible pour limiter son influence sur le courant de la cellule. Ceci peut être réalisé en optimisant le contact métal/semi-conducteur et en diminuant la résistivité du matériau utilisé. Cependant, un dopage élevé entraîne une augmentation des recombinaisons des porteurs. [5], [23],[31].
- La résistance parallèle  $R_p$  modélise les courants de fuite qui court-circuitent la jonction, causé par un défaut. Ceci est le cas lorsque la diffusion des contacts métalliques à haute température perce l'émetteur. Elle peut aussi être due à un court-

circuit sur les bords de la cellule. Cette valeur doit être la plus élevée possible. [5], [23]

Le courant délivré par une cellule photovoltaïque éclairée s'écrit :

$$I(V) = I_{ph} - I_{obs}(V) \quad \text{I.2}$$

Où  $I_{ph}$  représente la densité de courant photo généré et

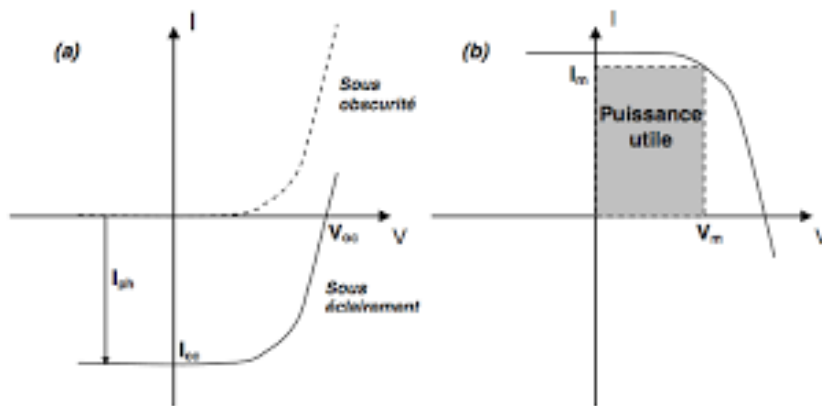
$I_{obs}$  la densité de courant d'obscurité

Pour une cellule photovoltaïque idéale, l'équation s'écrit :

$$I(V) = I_{ph} - I_s(\exp(qV/kt) - 1) \quad \text{I.3}$$

Avec  $I_s$  : le courant de saturation de la diode,  $q$  : la charge élémentaire,  $k$  : la constante de Boltzmann et  $T$  : la température.

Sous éclairement, la caractéristique d'une cellule photovoltaïque idéale est donc la superposition d'un générateur de courant et de la caractéristique de cette diode sous-obscurité [19]. Par convention, on inverse l'axe des courants, comme illustré sur la **figure I.12**.



**Figure I.12** : Caractéristique courant-tension d'une cellule solaire sous éclairement et sous obscurité (à gauche) et représentation conventionnelle de la courbe  $I=f(V)$  (à droite). [19]

A partir de la caractéristique  $I(V)$  de la cellule photovoltaïque, on déduit les caractéristiques propres de la cellule [19] à savoir :

- $I_{cc}$  : courant de court-circuit (obtenu pour  $V=0$ )
- $V_{co}$  : tension en circuit ouvert (obtenue pour  $I=0$ )
- $I_m$ : courant à la puissance maximale de fonctionnement
- $V_m$  : tension à la puissance maximale de fonctionnement

- FF : facteur de forme ou facteur de remplissage
- $\eta$  : rendement de conversion

$$\eta = \frac{\text{Puissance électrique maximale fournie}}{\text{puissance solaire incidente}} \quad \text{I.4}$$

$$\eta = \frac{V_m \cdot I_m}{P_i \cdot S} \quad \text{I.5}$$

Avec  $P_i$  : la puissance d'éclairement reçue par unité de surface et  $S$  : la surface de la cellule photovoltaïque.

#### I.4.5 La réponse spectrale

La réponse spectrale - grandeur macroscopique, exprimée en A/W- est une mesure du courant généré par unité de puissance en fonction de la longueur d'onde. L'énergie d'un photon et le gap d'un matériau étant connus, on peut déduire le nombre de paires électron/trou créées par le photon incident : c'est le rendement quantique externe noté EQE (External Quantum Efficiency). Si on tient compte de la réflexion de la lumière, on parle alors de rendement quantique interne noté IQE (Internal Quantum Efficiency) [30]. La relation entre les deux rendements quantiques est :

$$\text{EQE} = \frac{\text{nombre de porteurs de charge collectés}}{\text{nombre de photons incidents}} \quad \text{I.6}$$

$$\text{IQE} = \frac{\text{nombre de porteurs de charge}}{\text{nombre de photons incidents et absorbés}} \quad \text{I.7}$$

$$\text{IQE} = \frac{\text{EQE}}{1-R} \quad \text{I.8}$$

Où  $R$  représente la réflectivité de la surface.

#### I.4.6 Zones de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque

Les cellules photovoltaïques ont des caractéristiques  $I(V)$  non linéaires (**figure I.13**). Dans le cas d'un fonctionnement normal c'est-à-dire dans le cas où la cellule produit de l'énergie, la cellule est un générateur (zone 3). L'objectif est donc de faire travailler la cellule dans cette zone. [13]

La tension en circuit ouvert  $V_{co}$  d'une cellule photovoltaïque est comprise entre 0,3V et 0,75V selon le matériau utilisé, la température et son état de vieillissement. Son courant de

court-circuit  $I_{cc}$  varie principalement selon le niveau d'éclairement, les technologies et les tailles des cellules. [13]

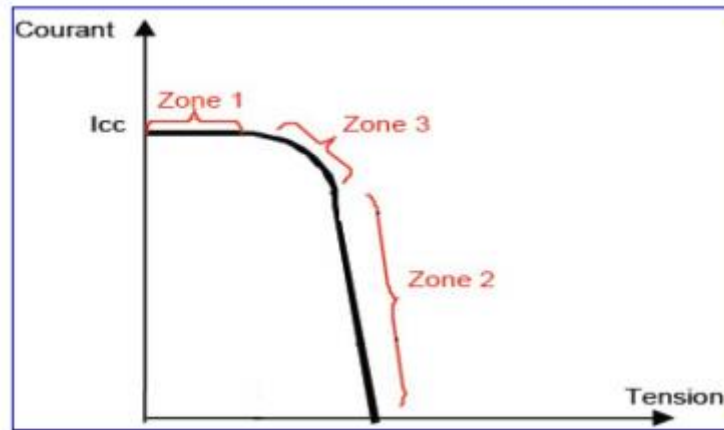


Figure I.13 : Caractéristiques I(V) d'une cellule photovoltaïque. [13],[24]

Dans la réalité, on doit ajouter une résistance série  $R_s$  pour tenir compte des résistances des électrodes et de celles induites par les interfaces électrode-semi-conducteur. On doit également ajouter une résistance parallèle  $R_p$  (résistance shunt en anglais) qui prend en compte le court-circuit dans la cellule (figure I.13). Ces court-circuits dans la cellule sont dus à la présence d'aluminium dans la couche active (diffusion d'aluminium lors de la réalisation de l'électrode) et aux charges au voisinage des interfaces qui ont tendance à recombiner les charges séparées. Le courant est alors donné par la relation :

$$I = \frac{R_p}{R_s R_p} \left[ I_s \left[ \exp \left( \frac{q(V - IR_s)}{n \cdot k \cdot T} \right) - 1 \right] + \frac{V}{R_p} - I_{ph} \right] \quad \text{I.9}$$

Où  $n$  est le facteur d'idéalité de la diode. [24]

## I.5 Avantages et inconvénients du PV

L'énergie photovoltaïque présente des avantages tels que :

- Avec un potentiel énorme réparti sur le globe terrestre, cette ressource naturelle est gratuite.
- Une utilisation propre,
- Une grande fiabilité,

- Nécessite peu d'entretien,
- Sa grande souplesse de production (variant du milliwatt aux mégawatts),
- Une utilisation autonome et décentralisée.

Malgré ces avantages, il y a aussi des inconvénients tels que :

- Le rayonnement solaire diffus nécessite de grandes surfaces,
- Les technologies sont très coûteuses,
- Le facteur de charge est faible,
- Le stockage est difficile,
- Le recyclage des composants du système photovoltaïque est difficile
- Les investissements et les différentes stratégies d'action dépendant des décisions politiques. [24]

### I.6 Pertes fondamentales et technologiques limitant le rendement

Qu'ils soient théoriques ou technologiques, plusieurs facteurs limitent l'efficacité d'une cellule solaire. Nous allons les résumer dans ce qui suit et verrons sur quels paramètres électriques ils influent [31].

#### I.6.1 Pertes fondamentales

L'utilisation du silicium engendre des pertes fondamentales inévitables. Ces pertes limitent le rendement théorique de la cellule solaire au silicium à 29.8% [31].

- Absorption incomplète des photons dont l'énergie est inférieure à l'énergie de la bande interdite (soit 1.12eV). Ils ne peuvent pas être absorbés par le silicium et donc ne contribuent pas à la création de paires électron/trou.
- Excès d'énergie des photons dont l'énergie est supérieure à celle de la bande interdite perdent l'énergie en excès par thermalisation, et donc ne participent donc pas à la création de paires électron/trou.
- Facteur de tension : La tension en circuit ouvert  $V_{co}$  ne peut dépasser la valeur de  $E_g/q$ . A cela s'ajoutent les recombinaisons Auger, qui limitent le à 0.65V

pour une cellule solaire de  $300\mu\text{m}$  d'épaisseur et à  $0.72\text{V}$  pour une cellule solaire de  $20\mu\text{m}$  d'épaisseur.

- Facteur de forme : Dans le cas idéal (si la courbe  $I(V)$  était carrée), le facteur de forme serait égal à 1. Cependant, la forme exponentielle de la caractéristique  $I(V)$ , limite le facteur de forme à 0.89.

### I.6.2 Pertes technologiques

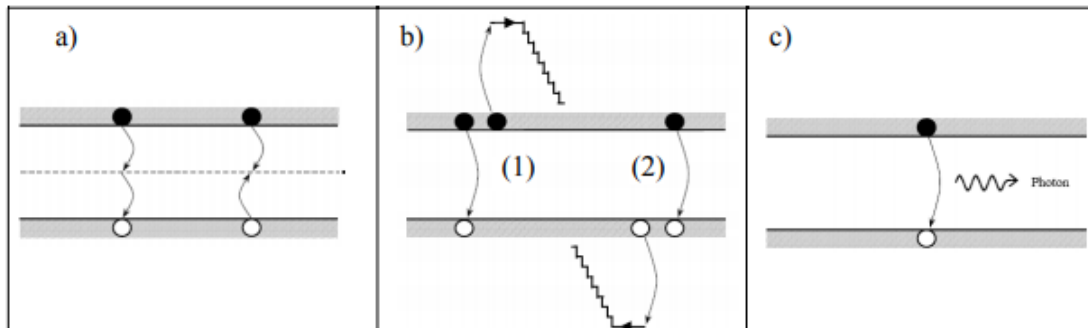
Mis à part les pertes citées ci-dessus, d'autres limitations réduisent encore le rendement. Elles sont de trois formes : optiques, résistives et par recombinaison. [31]

- Pertes optiques : elles sont dues à la non absorption d'un photon dans le silicium soit par :
  - ✓ Les réflexions : L'indice de réfraction du silicium ( $n=4$  à  $650\text{nm}$ ) étant supérieur à celui de l'air ( $n=1.5$  à  $650\text{nm}$ ), des réflexions vont se produire (à leur interface) et qui vont limiter le rendement de la cellule. Le coefficient de réflexion  $R$  peut être optimisé par la mise en place de couches anti reflet ainsi que des traitements de surface appropriés pour des réflexions multiples
  - ✓ Le taux d'ombrage : Pour collecter les porteurs, des contacts métalliques placés sur la face avant forment une surface opaque qui empêche les photons de pénétrer dans la cellule. Les dimensions des métallisations sont alors un compromis entre les pertes optiques dues à la couverture partielle de l'émetteur (taux d'ombrage) et les pertes de facteur de forme provoquées par la résistance série, liées à la taille des métallisations.
  - ✓ Le rendement d'absorption : Une partie des photons ayant l'énergie nécessaire, traverse l'épaisseur de la cellule sans être absorbée. Ce terme peut être minimisé en utilisant une couche réfléchissante sur la face arrière de la cellule (réflecteur arrière).
  - ✓ Le rendement de collecte : c'est le rapport entre le nombre de porteurs effectivement collectés et le nombre total de porteurs photo générés.
- Pertes par recombinaison :

Dans les semi-conducteurs et par effet photovoltaïque, les porteurs de charge libres se recombinent localement au lieu d'être séparés par le champ électrique de la jonction et diffusés jusqu'à la ZCE pour être collectés. Ceci se passe en général là où les défauts sont plus denses et la présence des impuretés est plus importante. [31]



Les mécanismes principaux responsables de la recombinaison en surface et en volume sont les suivantes : **(Figure I.14)**.



**Figure I.14** : Mécanismes de recombinaison.

a) Recombinaison SRH, b) recombinaison Auger, c) Recombinaison radiative [25]

- ✓ **La recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH)**: L'apparition des états électroniques dans le gap (défauts) par la présence d'impuretés et d'imperfections cristallines dans les semi-conducteurs, conduit au piégeage des électrons ou des trous pour les transférer ensuite vers la bande de conduction ou de valence, ce qui influe sur la conductivité du semi-conducteur. Ces défauts peuvent être des centres de recombinaison des paires électrons-trous par la capture d'un électron de la bande de conduction et un trou de la bande de valence provoquant ainsi leurs recombinaisons. [26]
- ✓ **Recombinaison Auger** : Dans le cas de niveaux de dopage élevés, la recombinaison d'Auger est présente. [27] C'est une recombinaison à trois particules où l'énergie libérée lors de la recombinaison d'un électron de la bande de conduction avec un trou de la bande de valence est transférée à un autre électron ou un autre trou [28]. La particule ainsi activée émet cette énergie sous forme de phonons dans le silicium. Le processus de recombinaison d'Auger est non radiatif, il est spécifique aux semi-conducteurs à gap indirect. [31]
- ✓ **Recombinaison radiative** : Les recombinaisons radiatives à la température ambiante dans le silicium sont directes, ou bande-à-bande [29,30], impliquant un électron de la bande de conduction et un trou de la bande de valence avec émission d'un photon d'énergie proche du gap. Ce mécanisme est peu probable dans le cas d'un semi-conducteur à gap indirect, comme c'est le cas du silicium, et peut être par conséquent négligé par rapport aux autres types de recombinaisons pour une cellule photovoltaïque en silicium. [31]

- Pertes résistives : Les pertes résistives affectent également le rendement en limitant le facteur de forme FF. Elles peuvent être dues à :
  - ✓ La résistance parallèle  $R_p$  causée en général par des fuites sur les bords de la cellule ou par la présence de court-circuit au niveau de l'émetteur. Sa valeur doit donc être maximale [31].
  - ✓ La résistance série  $R_s$  modélise les pertes résistives dues à la résistivité des différentes couches de la cellule : émetteur, base et contacts métalliques (en particulier leur interface avec le semi-conducteur). Sa valeur doit être la plus faible possible. [31]

### **I.7 Conclusion**

Dans ce chapitre, nous avons décrit d'une manière générale et assez simpliste des cellules solaires au silicium cristallin et leurs comportements optique et électrique. Après un rappel de quelques notions sur le rayonnement solaire et son application dans le domaine photovoltaïque, les éléments de base nécessaires à la compréhension du fonctionnement d'une cellule photovoltaïque ainsi que leurs caractéristiques principales ont été énoncés. Enfin, nous avons exposé les pertes fondamentales et technologiques limitant le rendement d'une cellule, pour arriver aux mécanismes de recombinaison.

## **Bibliographie :**

- [1] T. Nakada, A. Kunioka, *Applied Physics Letters* 72, 2444 (1999).
- [2] D. Liao, A. Rockett, *Journal of Applied Physics* 93, 9380 (2003).
- [3] B. L. Lara, A. M. Fernández, *The fifth International Renewable Energy Conference IEEE. Hammamet, Murch 2014*
- [4] Mertens, K., 2014. *Photovoltaics : fundamentals, technology and practice*, first edit. John Wiley & Sons Ltd, ed., United Kingdom.
- [5] Shockley, W., 1949. The theory of pn junctions in semiconductors and pn-junction transistors. *Bell Syst. Tech. J.*, 28.3, pp.435–489.
- [6] Chapin, D.M., Fuller, C.S. & Pearson, G.L., 1954. A new silicon p-n junction photo- cell for converting solar radiation into electrical power. *Journal of Applied Physics*, 25(5), pp.676–677.
- [7] Green, M., 2017. Corrigendum to “Solar cell efficiency tables (version 49).” *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 25(4), pp.333–334.
- [8] R.P. Linstead. 1016-1017, (1934).
- [9] D.D. Eley., *Nature*, 162, 819, (1948)
- [10] <http://www.tpepanneauxsolaires.fr/fonctionnement.html> (consulterle13/05/2016).
- [11] M.H. Cohen, H. Fritsch, and S.R. Ovshinsky: « Simple band model of amorphous semiconducting alloys », *Phys. Rev. Lett.*, Vol.22, N°20, p 1065-1068, 1969.
- [12] S. Dauwe, J. Schmidt, R. Hezel, « Surface très basse vitesses de recombinaison sur silicium de type p et n Gaufrettes passivées avec des amorphes hydrogénés films de silicium » dans: *Actes de la 29ème IEEE Conférence sur les spécialistes du photovoltaïque*, 2002 pp. 1246-1249.
- [13] C.S. Jiang, F.S. Hasoon, H.R. Moutinho, H.A. Al-Thani, M.J. Romero, M.M. Al-Jassim, *Applied Physics Letters* 82, 127 (2003).
- [14] J. Petterson, C. Platzer-bjorkman, U. Zimmermann, M. Edoff, *Thin Solid Films* 519, 7476 (2011).

- [15] T. Minemoto, T. Matsui, H. Takakura, Y. Hamakawa, T. Negami, Y. Hashimoto,
- [16] G. Masse and K. Djessas, "Close-spaced vapour transport of CuInSe<sub>2</sub>, CuGaSe<sub>2</sub>, and Cu(Ga,In) Se<sub>2</sub>", Thin Solid Films. 226, 258 (1993).
- [17] H. Bennacer, Mémoire de magister, Université de Sidi Bel Abbes, Algérie (2009).
- [18] <https://www.planete-energies.com/fr/medias/decryptages/les-deux-formes-du-solaire-le-solaire-photovoltaïque-et-le-solaire-thermique>
- [19] <https://www.planete-energies.com/fr/medias/decryptages/la-cellule-photovoltaïque-comment-ca-marche>
- [20] Loïc Bailly. Cellules photovoltaïques organiques souples à grande surface. Micro et nanotechnologies/Microélectronique. Université Sciences et Technologies - Bordeaux I, 2010.
- [21] N. Oleksiy, Thèse de doctorat, Institut national des sciences appliquées de Lyon (2005).
- [22] <https://www.techno-science.net/glossaire-definition/Ligne-a-haute-tension-page-3.html>
- [23] J. G. E. Gardeniers and H. A. C. Tilmans J.Vac.Sci.Technol.A.14 (5), Sep/Oct 1996.
- [24] A. Ricaud, 'Photopiles Solaires', Presses polytechniques et universitaires romandes. Lausanne, 1997.
- [25] A. Bouloufa, K. Djessas, A. Zegadi, Thin Solid Films 515, 6285 (2007). [12] R.W. Miles, G. Zappi, I. Forbes, Mater today 10, 20 (2007). [13] J.M. Burgelman, Thin Solid Films 515, 6276 (2007).
- [26] M. Johnson, International workshop on VLSI process and Device modelling, (1993 VPAD), (1993), pp.178-179.
- [27] Y. Laghla, 'Elaboration et caractérisation de couches minces de silicium polycristallin déposées par LPCVD pour application photovoltaïque', Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier de Toulouse, N° 3038(1998).
- [28] J. G. E. Gardeniers and H. A. C. Tilmans J.Vac.Sci.Technol.A.14 (5), Sep/Oct 1996.
- [29] M. E. Cowher and T. O. Sedgwick, J.Electrochem.Soc.119, (1972) 1565.
- [30] A. Ricaud, 'Photopiles Solaires', Presses polytechniques et universitaires romandes. Lausanne, 1997.

[31] B.BENABADJI, A.ZERGA ; Thèse de doctorat : “ Dimensionnement des émetteurs enterrés EWT des cellules solaires industrielles à base de silicium multicristallin” ;2018

***Chapitre II***  
***Les Cellules solaires à base de***  
***CuInSe<sub>2</sub>***

## II.1 Introduction

Comme nous l'avons cité dans le chapitre précédent, l'énergie solaire - en raison de son abondance - est en train de devenir l'une des principales sources d'énergie. Les cellules solaires convertissent cette énergie (solaire) en énergie électrique par absorption des photons par des matériaux semi-conducteurs. Les semi-conducteurs entrant dans la fabrication de ces cellules solaires font l'objet de multiples recherches, en vue d'améliorer leurs rendements de conversion.

Les cellules solaires en couches minces à base de CIS et CIGS sont des cellules à hétérojonction, où le semi-conducteur de type p, le CIS ou le CIGS, est l'absorbeur de la cellule (c'est-à-dire la zone où les paires électrons trous sont générées sous illumination). La jonction est formée avec le CdS/ZnO, des semi-conducteurs de type n. Le ZnO est appelé couche fenêtre, car il doit laisser passer le rayonnement jusqu'à l'absorbeur.[17]

Dans ce chapitre nous décrivons la structure d'une cellule solaire à base de  $\text{CuInSe}_2$ , le rôle et les caractéristiques des différentes couches constituant la cellule, à savoir sa structure cristalline, les propriétés électriques et optiques pour les cellules solaires à base de **CuInSe<sub>2</sub>**.

## II.2 Structure de l'état solide

On distingue deux types de solides :

1. Le solide non cristallin ou amorphe dans lequel les atomes ou groupes d'atomes sont arrangés d'une manière très irrégulière, presque aléatoire [1].
2. Le solide cristallin où l'arrangement des atomes ou groupes d'atomes présente le même ordre régulier sur la totalité du volume du solide (solide monocristallin) ou à l'échelle de domaine, appelé cristallite (solide poly cristallin) [1].

L'arrangement régulier des cristaux monocristallins permet de définir les trois vecteurs élémentaires,  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$  appelés aussi vecteurs de translation fondamentaux (ou primitifs) et les paramètres angulaires  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  respectivement entre  $\vec{b}$  et  $\vec{c}$ ,  $\vec{c}$  et  $\vec{a}$  et  $\vec{a}$  et  $\vec{b}$ , régissant la périodicité. Un vecteur position  $\vec{R}$  assurant une translation d'un nombre entier de fois des vecteurs  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$  est donné par :

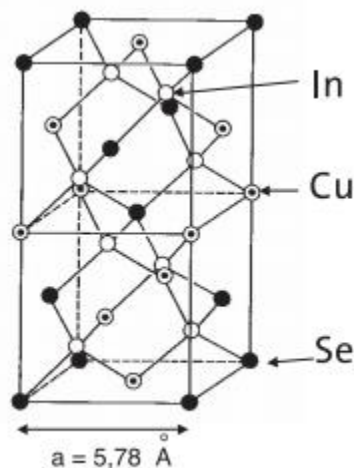
$$\vec{R} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c} \quad (n_1, n_2, n_3 = 0, \pm 1, \pm 2) \quad (\text{II.1})$$

Le parallélépipède, construit avec les trois vecteurs unitaires, forment la cellule unité d'un réseau appartenant à sept systèmes cristallins et ayant des points soit aux sommets (simple S), soit au centre (centré C), aux centres des faces (faces centrées FC), aux centres de deux faces opposées (base centrée BC) [1].

## II.3 Propriétés structurales et électroniques du CIS

### II.3.1 Structure du cristal

Les composés ternaires I-III-VI<sub>2</sub>, de formule ABC<sub>2</sub> (ex : CuInSe<sub>2</sub>), ont une structure cristalline dérivée du réseau cubique du silicium. Comme pour les composés III-V et II-VI, cette structure est constituée d'un sous-réseau anionique (ions C<sup>2-</sup> : Se<sup>2-</sup>) et d'un sous-réseau cationique (ions A<sup>+</sup> et B<sup>3+</sup> : Cu<sup>+</sup> et In<sup>3+</sup>). La phase chalcopyrite, la seule à posséder de bonnes propriétés pour les applications photovoltaïques, correspond à un agencement ordonné des cations A<sup>+</sup> et B<sup>3+</sup> dans leur sous-réseau. Le CIS peut avoir une conductivité électrique de type n ou de type p, dominée par les écarts à la composition stœchiométrique qui se traduisent par la présence de nombreux défauts dans la structure du matériau, dont certains sont électriquement chargés. Un excès de sélénium conduira au type p, un déficit en sélénium conduira au type n. Ceci est très différent du silicium, dont le dopage est obtenu par ajout d'atomes étrangers. Les semi-conducteurs non-stœchiométriques connus ont généralement un caractère semi métallique, peu propice à un effet photovoltaïque.



**Figure II.1** : Structure cristalline de CuInSe<sub>2</sub> [17]



Le semi-conducteur  $\text{CuInSe}_2$  est donc un matériau composé de structure chalcopyrite et qui présente un grand intérêt pour la conversion photovoltaïque de l'énergie solaire. C'est un semi-conducteur assez particulier. Il est composé d'atomes de cuivre baladeur, d'atomes de sélénium gros et immobiles, et d'atomes d'indium plus petits. L'atome de cuivre bouge au hasard dans le solide. Lorsqu'il rencontre un endroit endommagé, il va s'associer aux atomes déplacés ou manquants de manière à restaurer la fonctionnalité du matériau. De cette façon, les défauts qui apparaissent régulièrement dans la structure cristalline du semi-conducteur seront régulièrement réparés. Ce qui rend ce matériau moins sensible aux impuretés.

Contrairement à tous les autres semi-conducteurs, le  $\text{CuInSe}_2$  préserve ses propriétés électroniques quelles que soient les contraintes extérieures, voire les améliore. Son gap direct avec une valeur de 1,02 eV lui permet d'absorber une large gamme du spectre solaire, son coefficient d'absorption -d'environ  $5 \cdot 10^5 \text{cm}^{-1}$  qui est très élevé dans le domaine du visible et du proche infrarouge- permet à une couche de  $\text{CuInSe}_2$  avec une épaisseur de 1 à 2  $\mu\text{m}$  d'absorber 99 % des photons qui arrivent à la surface de la cellule. En plus, il peut être élaboré par plusieurs techniques et sur différents types de substrat. Les méthodes de dépôt du CIS sont variées et la plus commune étant la coévaporation.

Malgré ces avantages, les dispositifs fabriqués à base du CIS, ainsi qu'à base des composés quaternaires (ex : CIGS), ne sont pas encore arrivés à leur limite théorique prévue.

### II.3.2 Importance des composés chalcopyrites

On peut citer plusieurs avantages des chalcopyrites :

- fabriqués en couches minces, ils peuvent être de type p ou de type n, ce qui permet une production à faible coût soit en homojonction ou en hétérojonction.
- Ce sont des semi-conducteurs à gap direct, donc leur longueur de diffusion des porteurs de charge minoritaires est minimale
- Ils ont une énergie de gap idéale pour la conversion de l'énergie solaire en énergie électrique à la surface de la terre (AM 1.5).
- Leurs paramètres de maille, et l'affinité électronique sont en bonne concordance avec ceux du CdS qui est aussi un semi-conducteur à gap direct. On peut dire que l'importance de ces matériaux réside dans leurs applications technologiques, en particulier dans le visible, et l'infrarouge par l'intermédiaire des cellules solaires où leur efficacité a été prouvée.

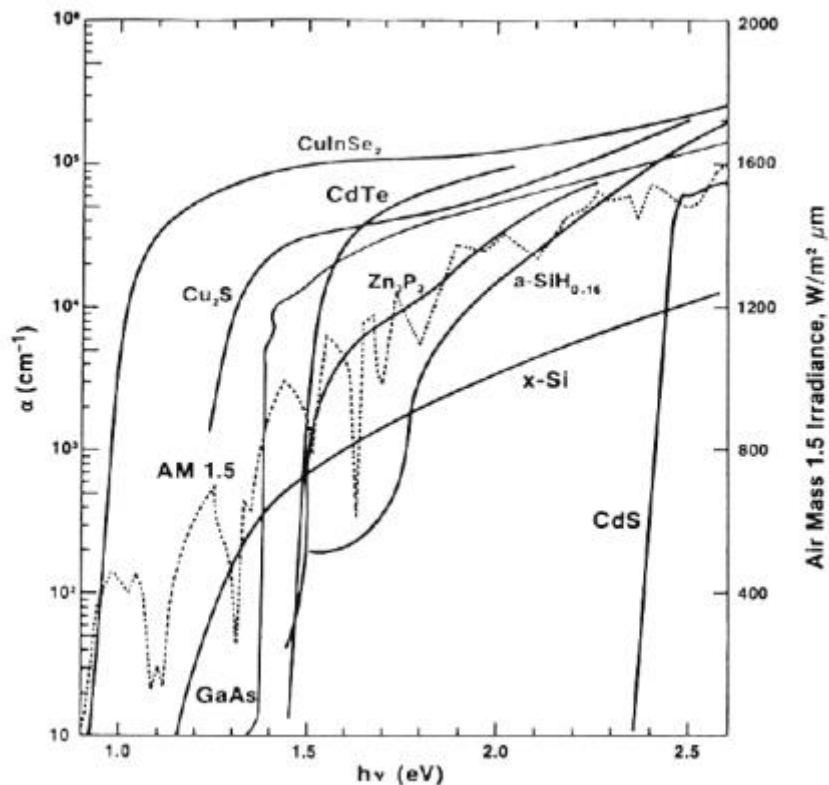
### II.3.3 Propriétés du CIS

Au cours des trente dernières années, les caractéristiques électriques, optiques, chimiques, structurales et magnétiques du CIS ont été étudiées par une variété de méthodes. Dans certaines techniques de mesure, des contacts ohmiques sont nécessaires.

#### II.3.3.1 Propriétés optiques

Le rendement des cellules solaires dépend principalement de la lumière absorbée par la couche absorbante. Du point de vue technologique, la couche absorbante doit avoir un gap optimal pour absorber la plus large gamme des longueurs d'ondes du spectre solaire avec un coefficient d'absorption élevé.

Le coefficient d'absorption de  $\text{CuInSe}_2$  est plus élevé comparé aux autres matériaux tel que le montre la figure II.2.



**Figure II.2 :** Coefficient d'absorption de quelques matériaux utilisés pour la fabrication des cellules solaires en couches minces [2].

Le  $\text{CuInSe}_2$  est un matériau semi-conducteur prometteur à bande interdite directe de l'ordre de 1.02eV mais une gamme des valeurs de 0.81 à 1.04 eV pour l'énergie de la bande interdite

a été rapportée dans la littérature [3]. Le problème de la détermination précise de  $E_g$  a été principalement attribué à la non-homogénéité des mesures sur l'échantillon considéré, puisqu'il n'était pas facile d'établir des mesures directes sur les échantillons volumiques, car le coefficient d'absorption est très grand. Ce problème a été résolu en réduisant l'épaisseur des échantillons à quelques microns. Le résultat de  $E_g$  obtenu était similaire à celui des couches minces donnant une valeur de  $E_g$  égale à  $1.01 \pm 0.001$  (eV) à la température ambiante [3].

Le coefficient d'absorption relativement élevé compris entre  $[10^4-10^5]$   $\text{cm}^{-1}$  dans le domaine du visible et du proche infra-rouge, permet au matériau d'absorber la quasi-totalité du spectre solaire pour une profondeur de 1.5-2 $\mu\text{m}$ .

Généralement les propriétés optiques dépendent considérablement de l'indice de réfraction complexe [4], ce dernier est donné par la relation suivante :

$$n_c = n - ik \quad (\text{II.2})$$

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 [4].

### II.3.3.2 Propriétés électriques de $\text{CuInSe}_2$

Les composés ternaires I-III-VI<sub>2</sub> de formule  $\text{ABC}_2$ , ont une structure cristalline constituée d'un sous réseau anionique ( $\text{Se}^{-2}$ ) et d'un sous réseau cationique ( $\text{Cu}^+$ ,  $\text{In}^{+3}$ ). La phase chalcopyrite, la seule à posséder de bonnes propriétés pour les applications photovoltaïques, présente une excellente stabilité électrique dans une large bande de stœchiométrie [5]. Le matériau  $\text{CuInSe}_2$  peut avoir une conductivité électrique de type n ou de type p, dominée par les écarts à la composition stœchiométrique qui se traduisent par la présence de nombreux défauts dans la structure du matériau, dont certains sont électriquement chargés. Un excès de sélénium conduira au type p, un déficit en sélénium conduira au type n. Ceci est très différent du silicium, dont le dopage est obtenu par ajout d'atomes étrangers. Les semi-conducteurs non stœchiométriques connus ont généralement un caractère semi-métallique, peu propice à un effet photovoltaïque. Le fait que le  $\text{CuInSe}_2$  soit un matériau extrêmement performant témoigne, selon la découverte récente [6], de la formation de défauts complexes électriquement inactifs, possédant de faible énergie de formation, qui accommodent les écarts à la stœchiométrie sans pénaliser les performances. Le cuivre est de ce fait faible dans ces matériaux, ce qui explique

les mécanismes d'autoréparation [6], observés après le bombardement électronique, qui en font l'un des semi-conducteurs les plus résistants aux radiations connus actuellement.

### **II.3.3.3 Propriétés mécaniques**

Les données expérimentales sur les propriétés mécaniques de  $\text{CuInSe}_2$  ont été rarement étudiées. Une étude faite par Neumann [7] a permis d'avoir une valeur de  $3.2 \cdot 10^{10} \text{ N/m}^2$  pour la dureté.

### **II.3.3.4 Propriétés thermiques**

La valeur estimée de la conductivité thermique est de  $0.086 \text{ W/(cm.K)}$  à la température ambiante. Le point de fusion du CIS est de l'ordre de  $987 \text{ °C}$  [8].

## **II.4 Défauts dans le matériau $\text{CuInSe}_2$**

Nous avons vu précédemment que le CIS présente une structure cristalline ordonnée. Cependant, et loin du cas idéal, tout écart à la périodicité du réseau ou à la structure du matériau est un défaut. La caractérisation des défauts peut être effectuée par des méthodes spectroscopiques (luminescence, admittance électrique) ou par l'analyse des caractéristiques des dispositifs (I-V en fonction de la température, réponses spectrales).

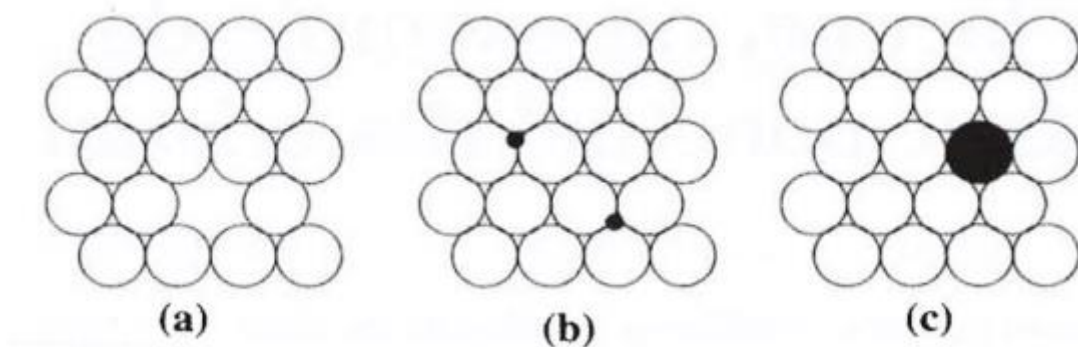
Les propriétés des matériaux semi-conducteurs sont fortement influencées par les impuretés ou les défauts. Ces derniers sont généralement introduits intentionnellement pour assurer une bonne conductivité électrique ou de manières non intentionnelles. Parmi les défauts, on peut citer les défauts ponctuels à savoir les défauts intrinsèques et les défauts extrinsèques.

### **II.4.1 Défauts intrinsèques (ou ponctuels simples)**

Ces défauts sont liés aux imperfections du réseau cristallin. Ils sont présents dans tous les cristaux quelle que soit la technique employée pour leur croissance. Ils introduisent des niveaux d'énergie peu profonds. Les principaux défauts intrinsèques qui sont généralement présents dans les ternaires  $\text{CuInSe}_2$  se divisent en trois parties :

- Lacunes : ce défaut peut se définir comme l'absence d'un atome en un site normalement occupé. Elles se forment surtout à la surface des cristaux. Ce type de défaut est présenté dans le composé ternaire  $\text{ABC}_2$  par VA, VB, VC. Dans le CIS, les lacunes sont présentées par :  $\text{VCu}$ ,  $\text{VIn}$  et  $\text{VSe}$ .

- Interstitiels : les atomes se logent dans les sites normalement interdits. Ce type de défaut est présenté par  $A_i$ ,  $B_i$ ,  $C_i$ . Il existe deux types d'interstitiels : les auto-interstitiels qui sont les atomes de même nature que ceux du cristal, et les hétéro-interstitiels qui sont les atomes de nature différente que celle du cristal. Dans le CIS, il est représenté par :  $Cu_i$ ,  $In_i$  ou  $Se_i$ .
- Anti sites (substitutionnels) : les atomes occupent les places des autres atomes. (Atome en position substitutionnelle). Ces défauts sont présentés par  $A_B A_C$ ,  $B_A B_C$ , ou encore  $C_A C_B$ . Dans le CIS, il est représenté par:  $Cu_{In}$   $Cu_{Se}$ ,  $In_{Cu}$ ,  $In_{Se}$  ou encore  $Se_{Cu}$   $Se_{In}$ .



**Figure II.3** : Exemples de défauts ponctuels simples. (a) Lacune. (b) Atome en position interstitielle. (c) Atome en position substitutionnelle. [18]

#### II.4.2 Défauts extrinsèques

Les défauts extrinsèques ou défauts chimiques sont des impuretés pouvant s'introduire soit involontairement pendant la synthèse cristalline ou le recuit, soit occasionnellement pour augmenter la conductivité électrique. Les caractéristiques des matériaux semi-conducteurs sont fortement influencées par ce type des défauts. Ces derniers sont souvent considérés comme facteurs de perte, par conséquent une concentration élevée de défauts diminue la possibilité de transport des porteurs, réduisant ainsi le rendement de conversion.

#### II.5 Structure de la cellule CIS

La figure II.4 ci-dessous représente la structure standard d'une cellule à base de  $CuInSe_2$  formée d'une superposition de plusieurs matériaux en couches minces déposés successivement sur un substrat.

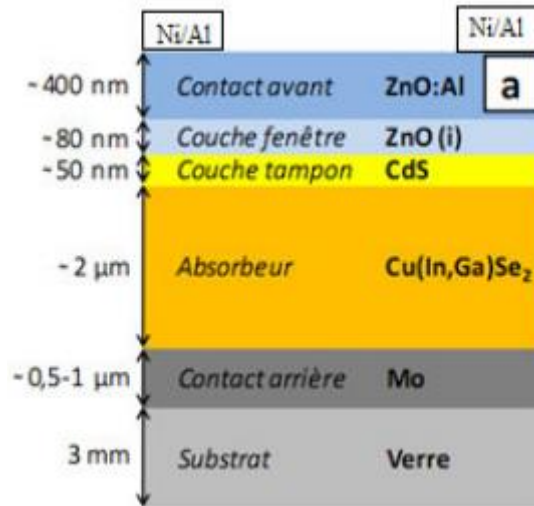


Figure II.4 : Structure d'une cellule solaire à base de CIS [14].

Les principaux éléments constitutifs de la cellule sont :

### II.5.1 Le substrat

Le substrat le plus utilisé habituellement est le verre sodocalcique (à base essentiellement de silice  $\text{SiO}_2$ , de calcium Ca et de sodium Na) et qui présente toutes les propriétés indispensables. Le sodium contenu dans le substrat diffuse vers le CIS lors de l'étape de recuit. Son action avantageuse sur le fonctionnement de la cellule a été démontrée par de nombreux auteurs [9].

### II.5.2 Contact arrière

Le contact arrière est un métal déposé sur la partie inférieure de l'absorbeur. Son rôle principal est de collecter les porteurs à partir de l'absorbeur et de les acheminer vers la charge externe. Il constitue le pôle positif du générateur photovoltaïque. Il doit donc, répondre à certains critères chimiques, mécaniques et économiques. De nombreux métaux ont été étudiés comme le Tungstène, le Molybdène, l'Or, l'Aluminium, l'Argent ou encore le Cuivre [10]. Parmi ces métaux, le matériau le plus utilisé – par les laboratoires de recherche et les industriels – comme contact arrière des cellules solaires à base de CIS est le Molybdène en raison de sa stabilité relative face aux températures élevées rencontrées lors du procédé de fabrication du CIS (des températures supérieures à  $500\text{ }^\circ\text{C}$ ), et de sa faible résistance de contact avec le CIS. Son épaisseur est d'environ 300 à 1000 nm. La valeur caractéristique de la résistivité du

Molybdène est de l'ordre  $5 \times 10^{-5} \Omega\text{cm}$  ou moins. De plus, il ne réagit pas avec le CIS et ne diffuse pas à l'intérieur.

### II.5.3 L'absorbeur

L'absorbeur est la partie de la cellule dans laquelle les photons vont être convertis en paires électrons-trous. Dans notre cas, l'absorbeur est un semi-conducteur de type P de la famille I-III-VI. Cependant, des études ont conduit à d'autres variantes à partir de 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 est le  $\text{Cu} (\text{In}, \text{Ga}) \text{Se}_2$  [11], alors que celui qui fait l'objet de notre étude est le  $\text{CuInSe}_2$ .

### II.5.4 La couche tampon

La couche tampon est un semi-conducteur de type N dont le gap doit être supérieur à celui de l'absorbeur. Elle protège la surface de l'absorbeur lors du dépôt par pulvérisation cathodique de la couche de ZnO, dépôt qui peut engendrer des défauts à la surface du CIS [12]. Cette couche tampon adapte la largeur de la bande interdite entre l'absorbeur et la couche fenêtre [13] et limite les recombinaisons des porteurs à l'interface de ces deux couches. Plusieurs semi-conducteurs de type N dont les bandes interdites sont situées entre 2,0 et 3,6 eV ont été appliquées comme couche tampon pour les cellules solaires CIS. Cependant, la couche de CdS ( $\approx 50\text{nm}$ ) déposée par bain chimique (CBD) reste le matériau attiré car il donne toujours des hauts rendements. Néanmoins, sa largeur de bande interdite, égale à 2,4 eV relativement faible entraîne des pertes optiques, de sorte que des quantités importantes de lumière sont absorbées avant de pouvoir atteindre la couche de CIS. Les photons absorbés dans le CdS ne contribuent pas au photo courant, 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 comme le ZnS ou le ZnSe.

### **II.5.5 La couche fenêtre**

La couche fenêtre doit être à la fois transparente, (afin de laisser passer suffisamment de lumière à la région de jonction et la couche absorbante de la cellule solaire à base de CIS), et conductrice pour permettre le transport du photo-courant généré à la charge extérieure sans trop de pertes. Cette couche fenêtre est constituée d'oxyde transparent conducteur (TCO), sur lequel une fine grille métallique doublée (Ni-Al) est déposée de façon à réduire la résistance série de la couche fenêtre et de collecter les charges générées par le dispositif. Le TCO, généralement utilisé pour les cellules CIS ou CIGS, est l'oxyde de Zinc (ZnO). Une bicouche de ZnO est couramment utilisée pour le contact avant transparent. La première couche est une couche mince de ZnO intrinsèque (i-ZnO) de l'ordre de 50 à 100 nm d'épaisseur et doit être très résistive. Elle sert à limiter la formation de court-circuit dans les zones présentant un recouvrement imparfait du CIS par la couche tampon. La seconde couche est souvent du ZnO dopé à l'Aluminium (ZnO : Al). L'épaisseur et le dopage de cette couche sont ajustés de façon à combiner transparence et conductivité. La bande interdite de la couche fenêtre doit être aussi élevée et aussi mince que possible afin de maintenir une faible résistance série. Le ZnO et le ZnO : Al ont respectivement des bandes d'environ 3,2 eV et 3,6 à 3,8 eV.

### **II.5.6 La jonction P-N**

La jonction P-N dans les cellules solaires à base de CIS est formée entre le semi-conducteur type P (CIS) et le semi-conducteur de type N (CdS). Le diagramme d'énergie de bande de cette cellule est représenté sur la figure (II.5).



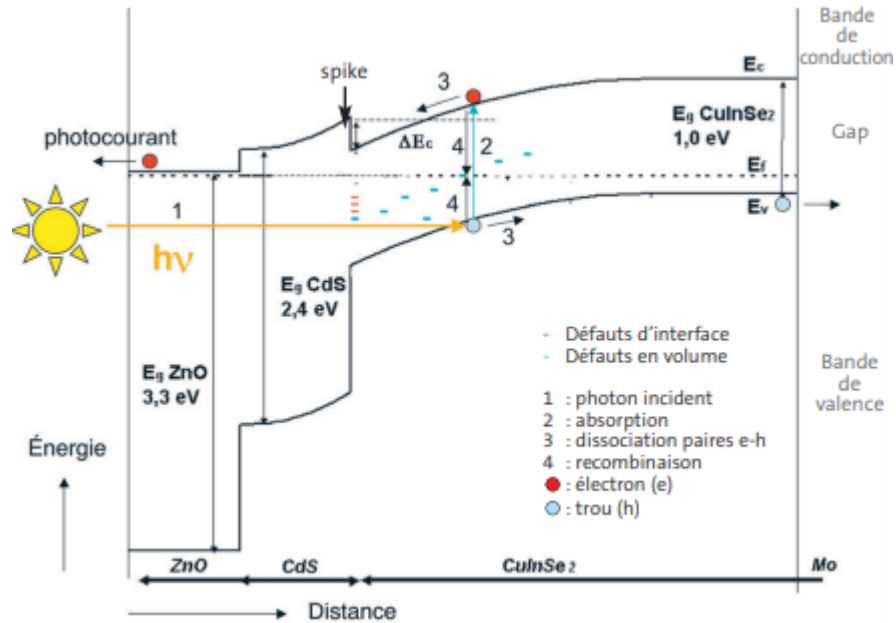


Figure II.5 : Diagramme de bandes d'une cellule CIS/CdS/ZnO[15]

La différence des affinités électroniques des deux matériaux constituant la jonction se traduit par une discontinuité de la bande interdite. La courbure de la bande de conduction ou  $\Delta E_c$  (Conduction Band Offset) entre le CIS et le CdS est par convention positive, ce qui signifie que la bande de conduction de CdS est supérieure à celle de CIS.

## II.6 Le dépôt des couches minces

Comme nous l'avons cité précédemment, notre dispositif est formé d'un empilement de couches minces déposées sur un substrat. Leurs propriétés sont étroitement liées aux techniques de dépôt. On distingue deux méthodes de dépôt :

### II.6.1 Le dépôt par voie physique (PVD)

Le dépôt PVD (Physical Vapor Deposition) est le procédé le plus utilisé pour les dépôts de couches minces des matériaux. Il consiste à utiliser des vapeurs du matériau à déposer pour réaliser un dépôt sur un substrat quelconque. Le transport des vapeurs de la source vers le substrat nécessite un vide assez poussé ( $10^{-5}$  à  $10^{-10}$  Pa) pour transporter les atomes en évitant la formation de poudre ou toute autre forme de pollution liée à une condensation.

## II.6.2 Le dépôt par voie chimique (CVD)

Il est largement utilisé pour sa fiabilité, ses vitesses rapides de dépôts et sa capacité d'élaborer des couches avec des compositions variées. Contrairement à la (PVD), les méthodes par (CVD) n'utilisent pas une source de vapeurs mais des précurseurs gazeux qui réagissent chimiquement pour former une couche solide déposée sur un substrat (des vapeurs de précurseur sont transportées en phase gazeuse jusqu'à la surface du substrat où elle se décompose).

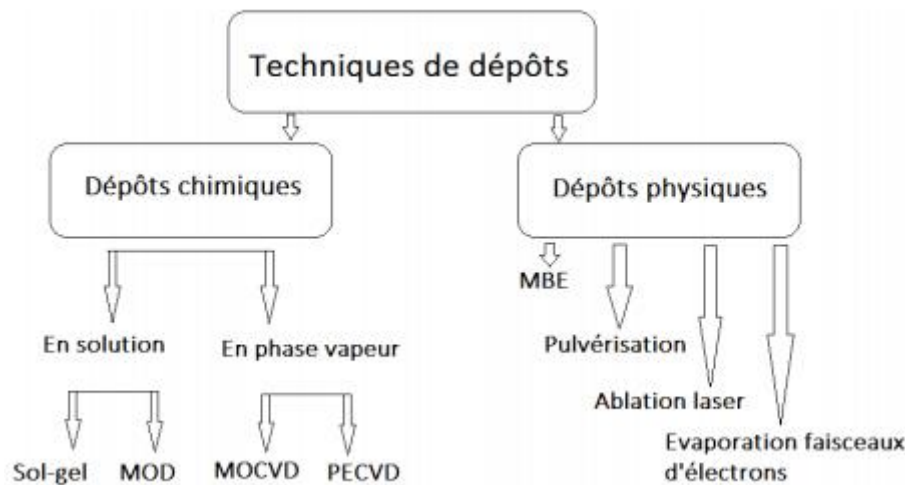


Figure II.6 : Les différentes techniques de dépôts de couches minces [16]

## II.7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons passé en revue les propriétés physiques du ternaire  $\text{CuInSe}_2$ , à savoir sa structure cristalline, ses propriétés optiques et électriques. On a aussi énuméré les défauts intrinsèques et extrinsèques rencontrés dans ce matériau. Ensuite, les principaux éléments qui constituent la cellule solaire à base de  $\text{CuInSe}_2$  sont exposés afin de comprendre le principe de base du fonctionnement de tels dispositifs. Enfin, les techniques de dépôt par PVD et CVD sont exposées.

## **BIBLIOGRAPHIE**

- [1] A. Mouhoub, S. Chelouche, "Etude de l'effet des états d'interface sur les paramètres photovoltaïques des hétérostructures CdS/CIGS". mémoire de fin d'étude, Département d'électronique sétif, 2003.
- [2] J.E. Jaffe, A. Zunger, Phys. Rev. 29 (1984) 1882.
- [3] H. Neumann, R.D. Tomlinson, Sol. Stat. Commun. 57 (1986) 591.
- [4] A. Bensehil, F. Bouaicha, "Modélisation Numérique des Hétérostructures à base de  $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$  par AMPS", Mémoire de fin d'étude, Département d'électronique, Université de Sétif (2005).
- [5] S.B. Zhang, S. Wei, A. Zunger, Phys. Rev. Lett. 78 (1997) 4059.
- [6] M.A. Contreras, K. Ramanathan, J. AbuShama, F. Hasoon, D. L. Young, B. Egaas, R. Noufi, Prog. Photovolt. Res. Appl. 13 (2005) 209.
- [7] H. Neumann, Sol. Cells 16 (1986) 317
- [8] Jean-Thomas Fonné, Diffusion ET séparation de phases dans des couches minces de silicates, Université Pierre et Marie Curie, 2017.
- [9] MR BOUANANI BOUALEM, Étude Technologique et Electrique Des Cellules Solaires en Couches Minces à Hétérojonctions ZnO/CdS/CIGS, 2015.
- [10] H. Neumann, Sol. Cells 16 (1986) 317.
- [11] Zouhair El Jouad. Réalisation et caractérisation des cellules photovoltaïques organiques. Physique [physics]. Université d'Angers, 2016. Français.
- [12] S.B. Zhang, S. Wei, A. Zunger, Phys. Rev. Lett. 78 (1997) 4059.
- [13] S-H. Wei, S. B. Zhang, and A. Zunger. "Effects of Ga addition to  $\text{CuInSe}_2$  on its electronic, structural, and defect properties". Applied physics letters, Vol. 72, N° 24(1998).
- [14] Ben Ali Mourad, Rahmouni Seddik, MASTER ACADEMIQUE "Elaboration et caractérisation des couches minces de  $\text{CuInS}_2$  par pulvérisation chimique réactive SPRAY -

Couche absorbante pour les cellules solaires', Université Ahmed Draïa Adrar 2009.

[15] <https://www.refletsdelaphysique.fr/articles/refdp/pdf/2007/03/refdp20075p16.pdf>.

[16] [https://www.researchgate.net/figure/1-Differentes-techniques-de-depot-de-couches-minces\\_fig28\\_280899768](https://www.researchgate.net/figure/1-Differentes-techniques-de-depot-de-couches-minces_fig28_280899768).

[17] Cellules solaires en couches minces à base de  $\text{CuInSe}_2$ , Daniel Lincot et Jean-François Guillemoles ; Institut de Recherche et Développement sur l'Énergie Photovoltaïque, Reflets de la Physique.

[18] Défauts dans les cristaux ; Physique et Applications - Structure de la matière ; Claire Laulhé

*Chapitre 3*

*Simulation numérique des  
Cellules solaires à base de  
CIS avec SCAPS-1D*

### **III.1 Introduction**

Les matériaux utilisés dans les applications photovoltaïques peuvent être produits dans une large variété de formes cristallines et poly cristallines. Bien que les matériaux cristallins aient montré de très hauts rendements de conversion, leur coût de production reste encore relativement élevé [1]. Diverses technologies utilisant des complexes de matériaux en couches minces sont apparues et ont gagné de plus en plus d'attention à cause de leurs performances, leurs stabilités et leurs faibles coûts de production. Parmi ces matériaux, le  $\text{CuInSe}_2$  est considéré comme l'un des choix les plus approprié vu les bonnes propriétés optiques qu'il présente. [6]

Malgré les hautes efficacités atteintes en matière de conversion photovoltaïque (> à 20 % au laboratoire) les cellules à base de  $\text{CuInSe}_2$  sont toujours en amélioration et font l'objet de beaucoup de sujets de recherche afin d'augmenter leurs performances. [7]

Pour mieux comprendre les mécanismes de fonctionnement de ces dispositifs -tels que les courants de transport, la génération électron-trou et les phénomènes de recombinaison- des modèles numériques pour la simulation sont établis. Ceci permet de comprendre les processus qui limitent les performances de la cellule et de donner une conception optimale des structures à base de ces dispositifs.

L'exploitation du logiciel SCAPS 1D, nous a conduits à simuler le comportement photoélectrique de la cellule CIS. Ceci se fait à partir de la simulation numérique de la caractéristique Courant-Tension  $I(V)$  sous les conditions d'éclairement solaire AM1.5. Notre investigation est de voir la sensibilité des paramètres photovoltaïques ou de sortie tels que le courant de court-circuit ( $I_{CC}$ ), le rendement de conversion électrique ( $\eta$ ), la tension de circuit ouvert ( $V_{CO}$ ) et le facteur de forme (FF) ainsi que la réponse spectrale en fonction des paramètres intrinsèques propres au dispositif tels que le dopage et les épaisseurs des différentes régions.

### **III.2 Présentation du logiciel SCAPS :**

La simulation est un moyen performant d'analyse et de compréhension des phénomènes physiques dans les dispositifs à semi-conducteurs. Plusieurs algorithmes et logiciels différents sont utilisés pour simuler, comprendre, prédire et optimiser le fonctionnement des dispositifs à semi-conducteurs à partir d'équations différentielles bien connues dans la littérature traitant les semi-conducteurs qui sont : l'équation de Poisson et les deux équations de continuité des

électrons et des trous. [Sidi Ould Saad Hamady] Ces équations rendent compte des phénomènes de conduction dans le volume du semi-conducteur et aussi dans les régions sièges de charge d'espace. A cause de l'aspect non linéaire de ces équations, il est impossible de résoudre analytiquement le système d'équations et l'emploi des méthodes numériques s'avère indispensable.

### **III.2.1 Aperçu théorique**

Le logiciel de simulation est basé sur la résolution des trois équations fondamentales d'un semi-conducteur, à savoir l'équation de poisson et les deux équations de continuité [1] :

$$\nabla \varepsilon \nabla \varphi = -q(p - n + N_{D^+} - N_{A^-}) \quad (\text{III.1})$$

Pour les électrons :  $\nabla \cdot \vec{J}_n = q(R - G) + q \frac{\partial n}{\partial t}$  (III.2)

Pour les trous:  $-\nabla \cdot \vec{J}_p = q(R - G) + q \frac{\partial p}{\partial t}$  (III.3)

Où :

$\varepsilon$  est la constante diélectrique ;  $\varphi$  le potentiel électrostatique ;  $n$  et  $p$  les concentrations des porteurs libres ;  $N_{D^+}$  et  $N_{A^-}$  sont les densités des accepteurs et donneurs (impuretés) ionisés ;  $\vec{J}_n$  et  $\vec{J}_p$  les densités des courants des électrons et des trous ;  $R$  le taux de recombinaison et  $G$  le taux de génération électron-trou.

#### **III.2.1.1 Les phénomènes de transport : les modèles de dérive-diffusion**

En l'absence d'un champ magnétique externe ou d'un gradient de température, le transport des charges se produit seulement par dérive et diffusion et peut être exprimé par les équations :

$$J_n = -q\mu_n nE + qD_n \nabla n \quad (\text{III.4})$$

$$J_p = -q\mu_p pE + qD_p \nabla p \quad (\text{III.5})$$

Où  $\mu_n$  et  $\mu_p$  sont les mobilités des électrons et des trous respectivement ;  $D_n$  et  $D_p$  les constantes de diffusion, et  $E$  est le champ électrostatique. Ces équations décrivent les phénomènes de transport dû au champ électrique et au phénomène de diffusion.

### III.2.1.2 Photo-génération

La densité de flux  $\phi$  dans le matériau semi-conducteur est donnée par la relation [2] :

$$\varphi(z) = \varphi(Z_0) \cdot e^{-(z-Z_0)} \quad (\text{III.6})$$

Où  $\phi$  est la densité du flux c'est à dire le nombre de photons par unité de surface et de temps (photons/cm<sup>2</sup>.s),  $\alpha$  est le coefficient d'absorption et  $z$  la profondeur de pénétration de la lumière. Dans le cas d'un semi-conducteur à gap direct,  $\alpha$  est donné approximativement par l'expression [2] :

$$\alpha_0 \propto (E - E_g)^{1/2} \quad (\text{III.7})$$

Le taux de génération est donné par la relation :

$$G(Z) = -\frac{d\varphi}{dz} = \alpha_i \varphi(Z_0) \cdot e^{-\alpha_i(z-z_0)} \quad (\text{III.8})$$

L'indice  $i$  renvoie au type de la couche, dans ce cas : le ZnO, le CdS ou le CIS.

L'équation (III.8) décrit le taux de génération dû à une source lumineuse monochromatique. Dans la simulation, on suppose une illumination standard « One Sun » qui correspond au spectre AM1.5. Le taux de génération total est alors la somme des générations produites pour chaque longueur d'onde.

### III.2.1.3 Recombinaison

La présence d'impuretés joue un rôle très important dans le processus de recombinaison. Une impureté piège un électron (ou trou) qui par attraction coulombienne attire un trou (ou électron), ce qui provoque la recombinaison.

On distingue deux cas : Si le défaut qui a capturé un électron a une plus grande probabilité de capturer un trou que de le réémettre, cet électron vers la bande de conduction, il capture le trou et provoque une recombinaison, ce défaut porte le nom de centre de recombinaison. Si au contraire le défaut qui a capturé un électron a une plus grande probabilité de réémettre cet électron vers la bande de conduction que de capturer un trou, ce centre porte alors le nom de piège à électron.



### **III.2.2 Le logiciel SCAPS-1D**

SCAPS (Solar Cell Capacitance Simulator) est un programme de simulation de cellules solaires unidimensionnel développé au département d'électronique et de systèmes d'information (ELIS) de l'Université de Gand, en Belgique. Plusieurs chercheurs ont contribué à son développement : Alex Niemegeers, Marc Burgelman, Koen Decock, Johan Verschraegen, Stefaan Degraeve.

Le programme est disponible gratuitement pour la communauté de recherche photovoltaïque (universités et instituts de recherche). Il fonctionne sur PC sous Windows 95, 98, NT, 2000, XP, Vista, Windows 7 à 10 et occupe environ 50 Mo d'espace disque.

Le logiciel SCAPS-1D a été développé pour simuler de façon réaliste les caractéristiques électriques des cellules solaires en couches minces. Il a été testé intensivement pour les cellules solaires à base de CdTe, CIS et CIGS. Le programme SCAPS-1D trouve des solutions pour :

- les structures constituées d'un nombre arbitraire des couches semi-conductrices.
- les profils de dopage quelconques.
- les distributions énergétiques de donneurs / accepteurs (niveau unique ainsi que uniforme,...)

Les grandeurs simulées sont :

1. La caractéristique I-V
2. La capacitance en fonction de la tension « C-V »
3. La capacitance en fonction de la fréquence « C-f »
4. Le rendement quantique QE

Le protocole de simulation d'une cellule solaire par logiciel SCAPS est comme suit :

**Étape 1 :** Après le lancement du logiciel et l'ouverture de la fenêtre d'exécution, les paramètres (température, illumination,...) sont modifiés.

**Étape 2 :** La structure de la cellule à travers la fenêtre « définition panel » est par la suite définie.

**Etape 3 :** La simulation est exécutée en appuyant sur « calculate », les résultats de simulation (FF,  $\eta$ ) sont enregistrés dans la fenêtre « I-V panel ». On peut encore afficher et copier ces résultats sous forme de tableau en appuyant sur « show » [4].

La fenêtre principale du logiciel SCAPS 3201 est présentée sur la figure III.1 ci-dessous.

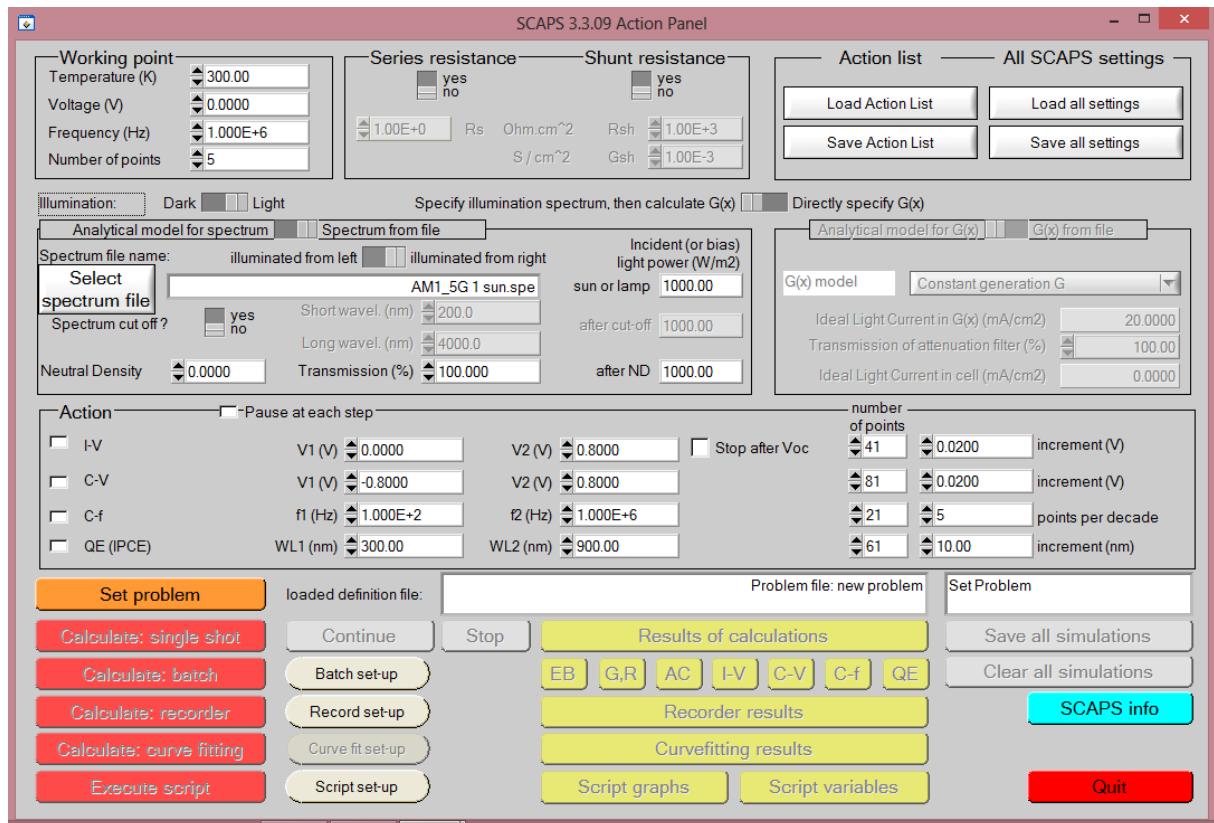


Figure III.1 : Fenêtre principale du logiciel SCAPS-1D.

### III.3 Les paramètres de la cellule utilisée (ZnO/CdS/CuInSe<sub>2</sub>)

On se propose de simuler les propriétés essentielles d'une cellule à base de CuInSe<sub>2</sub> ayant une structure composée d'un oxyde transparent conducteur (OTC) de type n-ZnO, une couche tampon n-CdS et d'une couche absorbante de type p-CuInSe<sub>2</sub>.

Les différents paramètres sont donnés dans le tableau III.1 [5]. Les valeurs des mobilités des trous posées pour le CIS sont aux environs des valeurs les plus récentes mesurées sur des films minces de CuInSe<sub>2</sub> avec  $\mu_e = 100 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  et  $\mu_h = 3-22 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  [5]. Les valeurs des masses effectives sont posées par défaut égales à  $0.2m_0$  et  $0.8m_0$  pour chaque couche ce qui est en concordance avec les valeurs rapportées dans les publications et travaux sur le CIS. [5]

	ZnO	CdS	CIS
<b>Paramètres</b>			
<b>Epaisseur W (<math>\mu\text{m}</math>)</b>	0.05-0.35	0.03	0.5-3
<b>Energie de gap <math>E_g</math> (eV)</b>	3.3	2.4	1,04
<b><math>N_c</math> (<math>\text{cm}^{-3}</math>)</b>	$2.2 * 10^{18}$	$2.2 * 10^{18}$	$2.2 * 10^{18}$
<b><math>N_v</math> (<math>\text{cm}^{-3}</math>)</b>	$1.8 * 10^{19}$	$1.8 * 10^{19}$	$1.8 * 10^{19}$
<b>Mobilité des <math>e^-</math> <math>\mu_e</math> (<math>\text{cm}^2/\text{V.s}</math>)</b>	25	25	25
<b>Mobilité des trous <math>\mu_h</math> (<math>\text{cm}^2/\text{V.s}</math>)</b>	100	140	140
<b>Permittivité</b>	9	10	13.6
<b>Affinité électronique</b>	4.45	4.2	4.5
<b>Densité des porteurs (<math>\text{cm}^{-3}</math>)</b>	$1.10^{14}$ - $1.10^{19}$	$5.10^{16}$ - $1.10^{20}$	$5.10^{16}$ - $1.10^{19}$

Tableau III.1 : Les paramètres de la cellule simulée ZnO/CdS/CuInSe<sub>2</sub> [1].

W est l'épaisseur de la couche,  $\mu_h$  et  $\mu_e$  les mobilités des trous et des électrons,  $N_D$  et  $N_A$  les densités des dopants légers,  $E_g$  l'énergie de gap,  $N_c$  et  $N_v$  les densités d'états effectives.

La figure ci-dessous représente la cellule solaire telle que simulée par SCAPS :

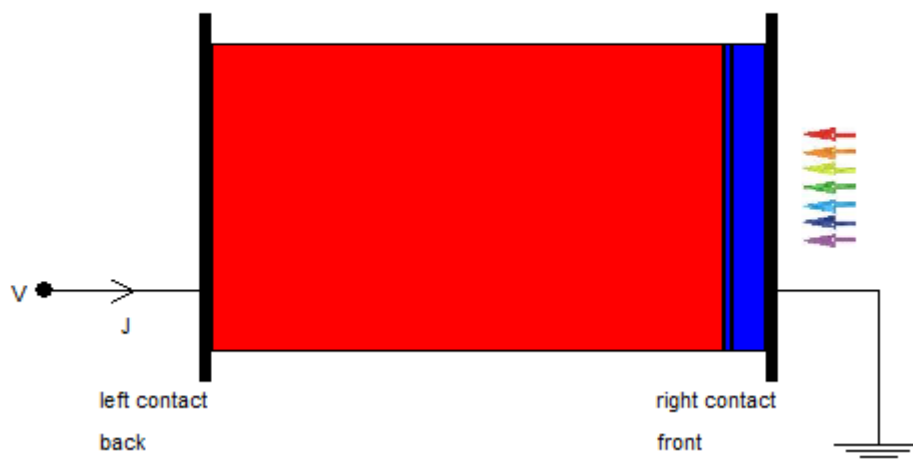


Figure III.2 : la cellule solaire simulée par SCAPS

### III.4 Rappel des grandeurs électriques d'une cellule solaire :

La caractéristique  $I=f(V)$  (figure III.2) est une fonction qui décrit le comportement de la photopile, et à partir de laquelle plusieurs paramètres relatifs à la cellule peuvent être calculés.

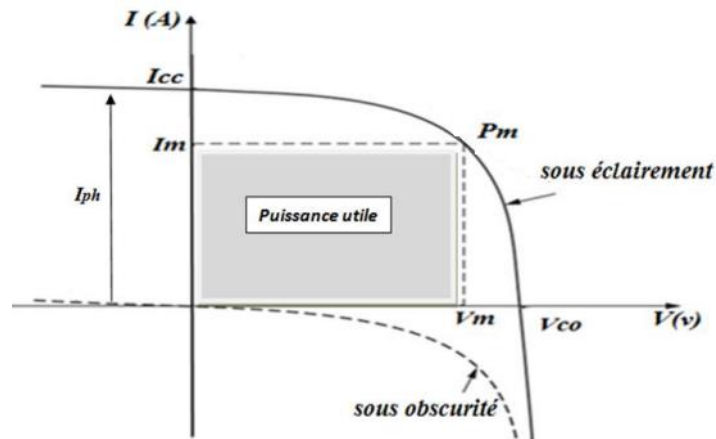


Figure III.3 : Caractéristique I-V d'une cellule solaire.[8]

- **Le courant de court-circuit  $I_{cc}$**

$I_{cc}$  correspond à l'intensité du courant de court-circuit, c.à.d.  $V=0$ . Il est directement proportionnel à l'énergie du rayonnement à la température ambiante et à la surface de la cellule.

- **La tension à circuit-ouvert  $V_{co}$**

La valeur  $V_{co}$  correspond à la tension en circuit ouvert c.à.d.  $I=0$ . Elle est fonction des caractéristiques de la jonction électronique et des matériaux.

- **La puissance maximale  $P_m$**

C'est la puissance maximale de sortie correspondant au point pour lequel le produit de la tension et de l'intensité du courant soit maximal, elle donnée par :

$$P_m = I_m \times V_m \quad (\text{III.9})$$

- **Le facteur de forme FF**

C'est le rapport entre la puissance maximale délivrée par la cellule et le produit entre  $I_{cc}$  et  $V_{co}$  correspondant à la puissance maximale idéale, il est exprimé par :

$$FF = \frac{V_{Pm} \cdot I_{Pm}}{V_{CC} \cdot I_{CC}} \quad (III.10)$$

- **Le rendement  $\eta$**

Le rendement mesure le taux de conversion énergétique, il est donné par :

$$\eta = \frac{P_m}{P_{in}} = \frac{V_{CO} I_{CC}}{P_{in}} \quad (III.11)$$

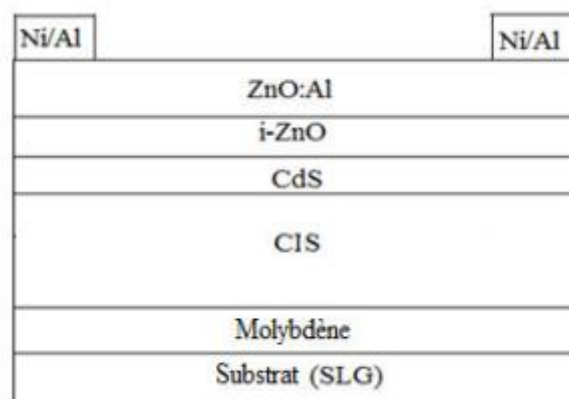
Où  $P_{in}$  la totalité de la puissance incidente.

- **La puissance crête  $P_m$**

La puissance crête d'une photopile, notée  $P_c$  (Watt crête) ou  $W_p$  (Watt peak) représente la puissance électrique maximale de sortie sous des conditions standard (STC : Standard Test Condition), une irradiance de  $1000W/m^2$ , une température de  $25^\circ C$  et un spectre de AM1.5.

### III.5 Simulation, résultats et discussions :

La figure (III.3) illustre la structure de la cellule solaire de référence à hétérojonction (n-ZnO/n-CdS/p-CIS) utilisée pour la simulation où le calcul des performances de la cellule s'effectue sous illumination standard AM1.5.



**Figure III.4 :** Structure d'une cellule solaire à base de  $CuInSe_2$  utilisée en simulation

Notons que, lors de la simulation, nous avons rencontré quelques difficultés à collecter toutes les grandeurs physiques relatives à une cellule solaire à base de  $CuInSe_2$ . Certaines, comme les largeurs de bande, les constantes diélectriques, les affinités électroniques, les propriétés optiques et électriques des différentes couches qui constituent notre dispositif de référence sont

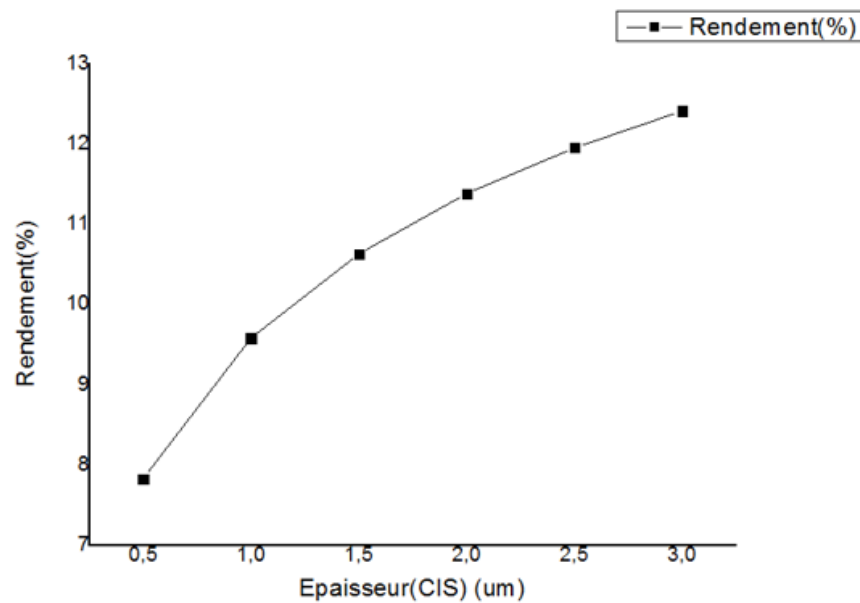
prises de la littérature. D'autres, comme les vitesses de recombinaison, les durées de vie ou encore les niveaux de dopage des différents matériaux sont pris dans des intervalles définis afin d'étudier leurs effets sur l'efficacité de notre cellule de référence. Les paramètres des trois couches de la cellule utilisés dans la simulation sont présentés dans le tableau (III.1).

### **III.5.1 Influence de l'épaisseur de la couche absorbante CuInSe<sub>2</sub>**

L'effet de la variation de l'épaisseur de la couche absorbante CIS et sur les grandeurs électriques de la cellule est donné par le tableau III.2.

Epaisseur de CIS (μm)	V <sub>co</sub> (V)	I <sub>cc</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	FF	η (%)
0.5	0.535	36.58	39.94	7.83
1	0.542	40.04	44.09	9.58
1.5	0.546	41.56	46.78	10.63
2	0.550	42.43	48.73	11.38
2.5	0.553	43.00	50.24	11.95
3	0.555	43.40	51.48	12.41

On remarque, d'après le tableau ci-dessus, que les valeurs V<sub>co</sub> et I<sub>cc</sub> augmentent lorsque l'épaisseur de la couche absorbante augmente car celle-ci absorbe de plus en plus de photons de grandes longueurs d'onde, ce qui influence positivement le taux de génération de paires électrons-trous. En effet, le CuInSe<sub>2</sub> est un semi-conducteur à gap direct engendrant une forte probabilité d'absorption. Grâce à son coefficient d'absorption important dans le domaine du visible et du proche infrarouge, 95% du rayonnement solaire incident qui arrivent à la surface de la cellule sont absorbés par seulement 2μm d'épaisseur. [10] alors que pour atteindre ce taux d'absorption dans le cas des cellules solaires à base de silicium cristallin, il faut une épaisseur d'environ 350 μm [13]



**Figure III.5 :** Le rendement de la cellule pour différentes épaisseurs de la couche CIS

On remarque d'après la figure III.5 une augmentation du rendement de la cellule à base de CIS en fonction de l'épaisseur de l'absorbeur. Pour les plus petites épaisseurs, le phénomène de générations de paires électrons-trous se passe près des interfaces avec le CdS et le contact arrière (forte densité de défauts donc des centres de recombinaisons) ce qui réduit le nombre de paires électrons-trous générées et donc de l'efficacité du dispositif. En revanche, pour des couches plus épaisses la génération se passe loin des interfaces c'est pourquoi, on observe une augmentation du rendement. Une épaisseur de 2.0 à 3.0  $\mu\text{m}$  paraît être adéquate pour avoir un rendement optimal.

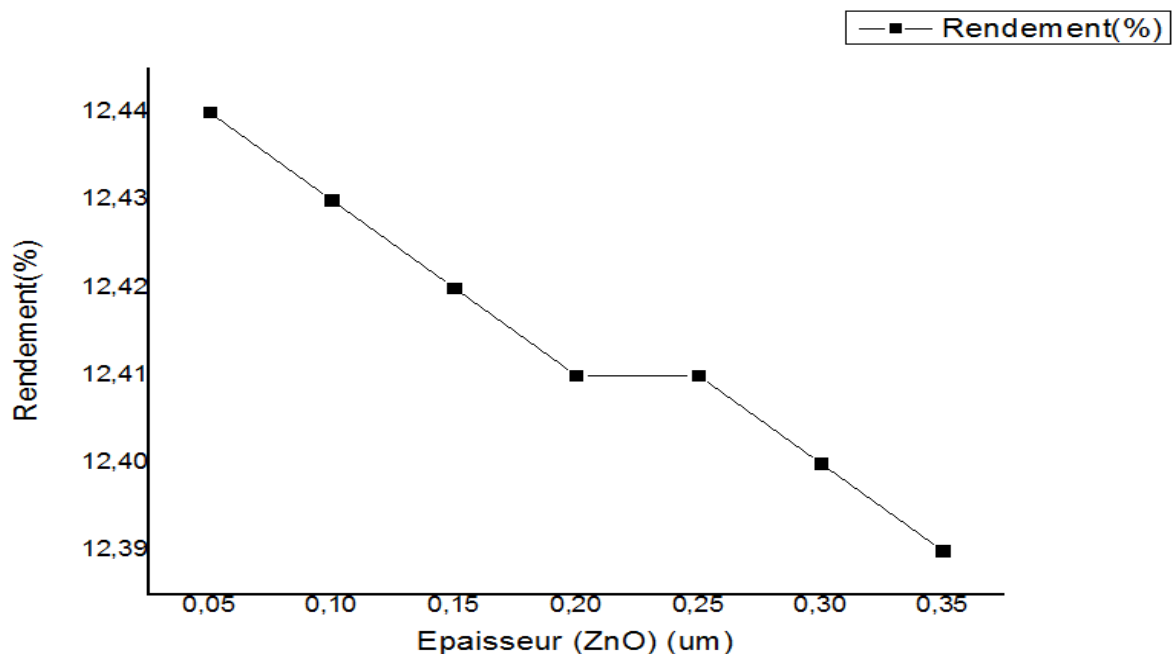
### III.5.2 Influence de l'épaisseur de la couche absorbante ZnO

Le premier contact entre les photons et la cellule solaire, est la couche fenêtre ZnO. Cette couche est caractérisée par un gap optique de 3.37 eV. Les paramètres électriques de la structure étudiée, pour différentes épaisseurs de couche ZnO, sont résumés dans le tableau (III.3).

Epaisseur de ZnO ( $\mu\text{m}$ )	$V_{co}$ (V)	$I_{cc}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	FF	$\eta$ (%)
0.05	0.5554	43.515766	51.48	12.44
0.1	0.5554	43.477140	51.48	12.43

0.15	0.5555	43.441707	51.48	12.42
0.2	0.5555	43.409195	51.48	12.41
0.25	0.5555	43.379298	51.48	12.41
0.3	0.5555	43.351746	51.48	12.40
0.35	0.5555	43.326305	51.48	12.39

A partir de ces résultats, on remarque une très faible influence de l'épaisseur de ZnO sur les performances de la cellule. Ils sont quasiment constants. Cependant, on choisit la plus faible épaisseur pour qu'elle puisse faire passer tout le rayonnement solaire incident qui doit être absorbé dans la couche CIS.



**Figure III.6 :** Le Rendement pour différentes épaisseurs de la couche ZnO

D'après la figure III.6, une faible diminution du rendement est notée, liée par l'augmentation de l'épaisseur de la couche de ZnO. En effet, Donc quand la couche ZnO est très épaisse, la performance relative au rendement de la cellule se dégrade en raison d'une part de l'augmentation de la résistance série (augmentation des pertes), et d'autre part l'absorption augmente (pour les grandes longueurs d'onde). Par conséquent, une épaisseur optimale de 50nm de la couche ZnO est nécessaire pour une meilleure performance de la cellule solaire.



### **III.5.3 Choix de l'épaisseur de la couche tampon CdS**

Le matériau proposé, dans le cadre de ce travail, -pour la formation de l'hétérojonction photovoltaïque avec le CIS- est le sulfure de Cadmium CdS. Pourquoi ce choix ?

Les films formés par les semi-conducteurs II-VI à large gap optique sont d'un grand intérêt technologique. Les éléments du groupe II du tableau périodique : comme le Cadmium (Cd) dans notre cas ou encore le Zinc (Zn), le Mercure (Hg) et les éléments du groupe VI : comme le soufre (S) dans notre cas ou encore l'Oxygène (O), le Sélénium (Se), le Tellure (Te) peuvent former entre eux des composés (AB) comme les sulfures CdS dans notre cas, les Oxydes (CdO, ZnO), Séléniures (ZnSe, CdSe), Tellurures (ZnTe, CdTe). Parmi ces semi-conducteurs et vu leurs propriétés importantes on va s'intéresser, dans cette partie aux films minces de CdS et leurs propriétés. [10]

La majorité des composés II-VI cristallisent soit dans une structure hexagonale (les paramètres de maille a varie de 4.05 à 4.16Å ; c varie de 6.52 à 6.72Å) ou dans une structure cubique (le paramètre de maille a varie de 5.81 à 5.83Å).[11]

Le CdS est un semi-conducteur de type n, son large gap direct le rend le matériau le plus utilisé pour les applications électroniques et optoélectroniques [10]. Dans les films de CdS déposés par la technique CBD (déposition bain chimique), la résistivité est souvent très élevée.

Les films de CdS très minces sont utilisés comme des couches tampons de type n dans les cellules solaires en couches minces basées sur les hétérojonctions (CuInSe<sub>2</sub>, CuInGaSe<sub>2</sub>) ou CdTe. Plusieurs groupes de recherches ont effectué des travaux fondamentaux sur les hétérojonctions CdS en utilisant le CIX (CuInSe<sub>2</sub>, CuInS<sub>2</sub>) ou le CdTe dans leurs procédés, le CdS agissant en tant qu'interface. Les paramètres de réseau du CdS s'accordent mieux avec ceux du diséléniure de cuivre et d'indium (CIS).[10]

En 1990, une couche mince de CdS, déposée par bain chimique et intégrée dans la structure Mo-CuInSe<sub>2</sub>-CdS-ZnO a produit un rendement de conversion de 11%. [12] ; ce qui est en parfaite concordance avec nos résultats.

Les calculs théoriques [10] prévoient que l'épaisseur du CdS doit être mince pour avoir un rendement élevé de la cellule. En tenant compte du fait que la lumière absorbée dans le CdS ne contribue pas significativement dans le photo courant collecté, il est souhaitable que cette

couche soit d'épaisseur minimale. Une couche mince du CdS avec son gap (allant de 2.3 à 2.4 eV) agit de sorte que l'absorption soit dans le domaine des courtes longueurs d'ondes. La photo génération des porteurs se passe essentiellement dans la couche absorbante du CIS. Donc l'exigence principale de cette couche est d'absorber la plupart de la radiation solaire incidente tout en évitant les recombinaisons. La minimisation des recombinaisons et la densité d'interface sont l'exigence de la couche CIS pour une meilleure performance du dispositif considéré. Le CIS avec son gap optique de 1.02 eV et son coefficient d'absorption élevé égale à  $10^5$  /cm font que +90 % des photons avec une énergie supérieure au gap optique ( $E_g$ ) peuvent être absorbés à l'intérieur de  $3\mu\text{m}$  de CIS.

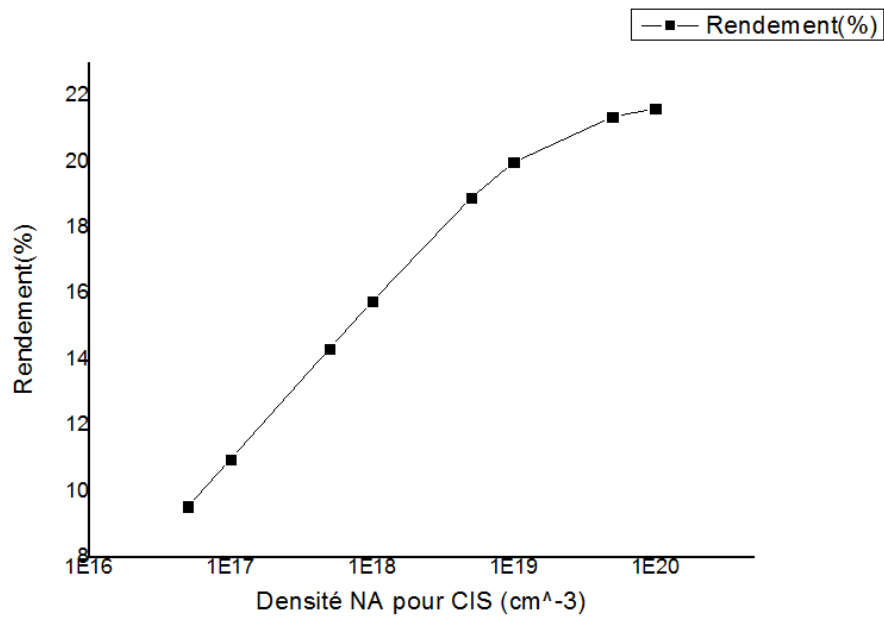
### III.6 Effet du dopage sur les grandeurs photovoltaïques

Le rendement des cellules à base de CIS est fortement influencé par les impuretés ou les défauts. Ces derniers sont ajoutés pour augmenter la conductivité électrique ou le contrôle de la durée de vie. Dans cette partie on s'intéresse à l'effet de la concentration de dopage des couches CIS et CdS sur les caractéristiques électriques pour cela on utilise les valeurs optimales trouvées en simulation.

#### III.6.1 Effet du dopage de la couche absorbante CIS :

On a fait la simulation pour les valeurs de dopage dans l'intervalle de  $10^{16}$  à  $10^{19} \text{cm}^{-3}$ , tout en gardant constants les dopages des couches tampon et fenêtre. Les résultats sont résumés dans le tableau (III.4).

Densité de dopage $N_A$ pour CIS ( $\text{cm}^{-3}$ )	$V_{co}$ (V)	$I_{cc}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	FF	$\eta$ (%)
5 E+16	0.5384	43.494845	40.73	9.54
1 E+17	0.5463	43.459019	46.20	10.97
5 E+17	0.5681	43.342914	58.18	14.33
<b>1 E+18</b>	<b>0.5777</b>	<b>43.301267</b>	<b>63.01</b>	<b>15.76</b>
<b>5 E+18</b>	<b>0.5960</b>	<b>43.242601</b>	<b>73.34</b>	<b>18.90</b>
<b>1 E+19</b>	<b>0.6016</b>	<b>43.229654</b>	<b>76.83</b>	<b>19.98</b>



**Figure III.7:** Le Rendement pour différents dopages de CIS.

On constate, d'après le tableau III.4 et la figure III.7, une amélioration des paramètres électriques du dispositif en fonction du dopage de la couche CIS. Lorsque le dopage de la couche CIS augmente, la barrière de potentiel dans l'hétérojonction augmente, et permet une diminution de la zone de charge d'espace, d'où une baisse de la collecte des porteurs photo générés et donc une diminution du courant de court-circuit. Cependant, il faut veiller à ne pas dépasser la limite de solubilité (qu'on n'a pas pu trouver dans la littérature).

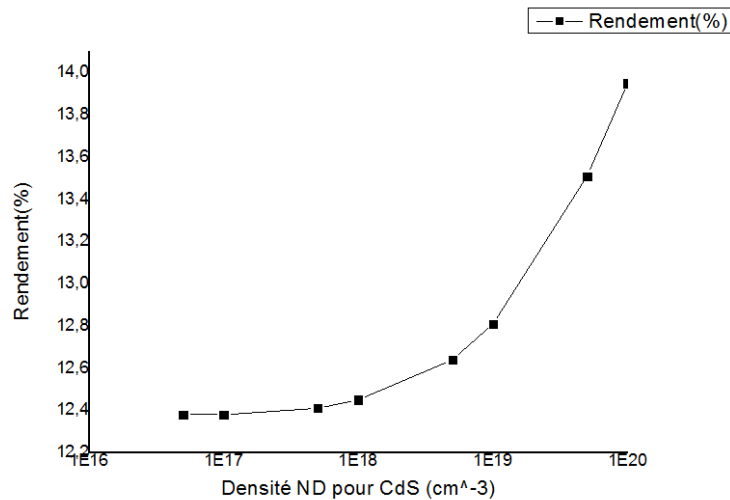
### III.6.2 Effet du dopage de la couche tampon

On a fait la simulation pour les valeurs de dopage dans l'intervalle variant de  $10^{16}$  à  $10^{20} \text{cm}^{-3}$ . Les résultats sont résumés dans le tableau (III.5).

Densité de dopage $N_D$ pour CdS ( $\text{cm}^{-3}$ )	$V_{co}$ (V)	$I_{cc}$ ( $\text{mA}/\text{cm}^2$ )	FF (%)	$\eta$ (%)
$5 \text{ E}+16$	0.5553	43.253815	51.53	12.38
$1 \text{ E}+17$	0.5554	43.297964	51.49	12.38
$5 \text{ E}+17$	0.5555	43.409195	51.48	12.41
$1 \text{ E}+18$	0.5555	43.448410	51.57	12.45
<b><math>5 \text{ E}+18</math></b>	<b>0.5554</b>	<b>43.497955</b>	<b>52.32</b>	<b>12.64</b>

<b>1 E+19</b>	<b>0.5553</b>	<b>43.505578</b>	<b>53.01</b>	<b>12.81</b>
<b>5 E+19</b>	<b>0.5555</b>	<b>43.518498</b>	<b>55.87</b>	<b>13.51</b>
<b>1 E+20</b>	<b>0.5559</b>	<b>43.527722</b>	<b>57.66</b>	<b>13.95</b>

Les valeurs des niveaux de dopage en gras dans les deux tableaux ci-dessus sont des valeurs qu'on a prises pour la simulation mais qu'on n'a pas pu vérifier à partir de la littérature.



**Figure III.8 :** Le Rendement pour différentes densités de dopage de CdS

Les résultats obtenus sont dressés dans le tableau III.5 et la figure III.8 montrent que l'augmentation du dopage de la couche CdS influe fortement sur le rendement  $\eta$  et le facteur de forme FF. Donc la valeur optimale de dopage de couche CdS est de  $1.8 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$  pour un rendement optimal de 13.10%.

En plus, lorsque le dopage de la couche tampon augmente, la barrière de potentiel dans l'hétérojonction CdS/CIS diminue, et permet une augmentation de la zone de charge d'espace, d'où une amélioration de la collecte des porteurs photo générés et donc une augmentation du rendement de conversion. Suite à ces résultats, nous pouvons dire que pour avoir une amélioration des performances pour une structure à base de CIS, nous devons utiliser une couche tampon de type n fortement dopée.

### III.6.3 Effet du dopage de la couche fenêtre

On a fait la simulation pour les valeurs de dopage dans l'intervalle variant de  $10^{14}$  à  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Les résultats sont résumés dans le tableau (III.6).

**Tableau III.6** : Paramètres électriques pour différentes densités de dopage de la couche ZnO

Densité de dopage $N_D$ pour ZnO ( $cm^{-3}$ )	$V_{co}$ (V)	$I_{cc}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	FF (%)	$\eta$ (%)
1E+14	0.5550	43.274	51.48	12.36
1 E+15	0.5550	43.282	51.49	12.37
1E+16	0.5552	43.324	51.49	12.38
1 E+17	0.5555	43.409	51.48	12.41
1E+18	0.5556	43.437	52.48	12.42
1E+19	0.5556	43.440	52.48	12.42

D'après le tableau ci-dessus, on remarque que la variation du dopage de la couche fenêtre n'influe pas du tout sur la tension en circuit ouvert, et influe très faiblement sur le courant de court-circuit et le facteur de forme. La variation du rendement est de l'ordre de 0.06. Ceci peut être expliqué par le fait que l'augmentation du niveau d'injection (dopage) peut améliorer leur conductivité.

### III.7. La structure optimale :

Notre étude de la cellule solaire simulée n-ZnO/n-CdS/p-CuInSe<sub>2</sub> à l'aide du logiciel SCAPS-1D a permis d'optimiser le rendement de la structure considérée. Ainsi, nous avons obtenu un rendement optimal  $\eta=12.42$  pour les valeurs optimales suivantes :

**Tableau III.7** : Structure optimale

<u>Couche</u>	<u>Epaisseur (<math>\mu m</math>)</u>	<u>Dopage (<math>cm^{-3}</math>)</u>
CuInSe <sub>2</sub>	3	$2.10^{17}$
CdS	0.05	$5.10^{17}$
ZnO	0.2	$1.10^{17}$

### **Conclusion :**

Dans ce chapitre, nous avons étudié l'influence des trois couches constituant une cellule solaire à base de  $\text{CuInSe}_2$  à savoir la couche absorbante CIS, la couche tampon CdS et la couche anti reflet ZnO (épaisseurs et dopage) par la simulation. Le logiciel SCAPS-1D a été utilisé dans le but de concevoir une structure optimale avec un rendement de collecte optimal. Une efficacité optimale de l'ordre de 12.42% a été obtenue.

## **Bibliographie**

- [1]I. Dehmous, Etude des couches minces de CuInSe<sub>2</sub> pour une application photovoltaïque. Université Abou Bekr Belkaid, Tlemcen. (2012).
- [2]D. Iincot et J. F. Guillemdes, Institut de recherche et développement sur l'énergie photovoltaïque
- [3] Daniel Lincot, Jean-François Guillemoles « Cellules solaires en couches minces à base de CuInSe » ; Reflets de la Physique n°5
- [4]S. Kohiki, M.Nishitani, T. Negami, K. Nishikora and T.Kerao. appl phys letters. (1991).
- [5]W. H. Bloss and H. W. Schock proc 8th.E.C photovoltaic solar energy conf Florence. (1988).
- [6] Naïma TOUAFEK, « Contribution à l'étude d'une cellule solaire en couches minces à base de CuIn<sub>1-x</sub>GaxSe<sub>2</sub> » ; thèse de doctorat,2015
- [7] Mohammed Mimoune ; « étude des capteurs photovoltaïques basés sur les nanotechnologies » mémoire présenté à l'Université du Québec à Trois-Rivières ; 2016
- [8] Sidi Ould Saad Hamady ; « Simulation numérique et caractérisation de matériaux semi-conducteurs III-N pour détecteurs ultraviolet et cellules solaires » ; Mémoire, 2017
- [9] Amer HAMZAOUI, « Effet de l'illumination sur les paramètres caractéristiques des cellules solaires au silicium polycristallin » ; Mémoire Magister, 2012
- [10] REZKI Hourya, « Elaboration et caractérisation des couches minces CuInS<sub>2</sub>, CdS pour la formation d'une jonction p-n ; application cellules photovoltaïque » ; Mémoire Magister 2015
- [11] Natalia S. Kozhenikova, Andrey A. Rempel, Frank Hergert, Andreas Magerl. Thin Solid Films 517 (2009) 2586.
- [12] P. K. Nair, M. T. S. Nair, V. M. Garcia, O. L. Arenas, Y. Perra, A. Castillo, I. T. Ayala, O. Gomez- Daza, A. Sanchez, J. Campos, H. Hu. R. Suarez, M. E. Rincon. Solar Energy Materials and Solar Cells 52 (1998) 313.
- [13] Ascri Rachid, « Etude des propriétés physique des chalcopyrites CuInSe<sub>2</sub>, CuGaSe<sub>2</sub>, Cu(In, Ga) Se<sub>2</sub> ' » ; thèse de Magister ;2011

*Conclusion générale*  
*et*  
*Perspectives*



## **Conclusion générale et perspectives :**

Le silicium- matériau le plus utilisé pour fabriquer les cellules photovoltaïques- est obtenu par réduction à partir de la silice (composé le plus abondant dans la croûte terrestre). La production des cellules photovoltaïques nécessite de l'énergie, et on estime qu'un module photovoltaïque doit fonctionner environ deux à cinq ans pour compenser l'énergie nécessaire à sa fabrication suivant la technique utilisée (retour énergétique du module). Les matériaux et procédés de fabrication font l'objet de programmes de recherche ambitieux pour réduire les coûts de fabrication et de recyclage des cellules photovoltaïques. En 2007, la croissance de la production mondiale de panneaux solaires a été freinée par manque de silicium et les prix des cellules n'ont pas baissé pour autant. L'industrie cherche donc à faire baisser la quantité de silicium utilisé. Les cellules monocristallines sont passées de 300  $\mu\text{m}$  d'épaisseur à 200, puis 150  $\mu\text{m}$  en 2019, diminuant la quantité de matière et d'énergie nécessaires, mais aussi les prix. En 2019, des cellules de seulement 0,2  $\mu\text{m}$  d'épaisseur sont produites avec un rendement de 20 %, mais le coût des procédés mis en œuvre ne les rendent accessibles que pour les applications spatiales.

Dans ce contexte, on assiste ces dernières années à l'émergence sur le marché de modules photovoltaïques basés sur d'autres matériaux que le silicium : le diséléniure de cuivre et d'indium,  $\text{CuInSe}_2$ , noté CIS, et ses combinaisons avec du gallium (CIGS) ou du soufre, ainsi que le tellure de cadmium,  $\text{CdTe}$ . Les rendements de conversion actuels records de ces cellules sont de 19,5 % pour le CIGS et de 16,5 % pour le  $\text{CdTe}$ . Les modules, dont la commercialisation vient de commencer, atteignent des rendements de 11 à 13 % pour le CIGS et d'environ 9 % pour le  $\text{CdTe}$ . L'attente envers ces nouvelles filières est de permettre d'importantes réductions des coûts de l'électricité photovoltaïque, en associant des technologies en couches minces (économie de matière car absence de découpe de lingots, épaisseurs de quelques microns, températures d'élaboration inférieures à 600 °C) et des performances élevées. L'objectif est un temps de retour en énergie de moins d'un an, inférieur à celui du silicium et un coût de module inférieur moindre.

Dans ce travail, une cellule solaire à base de CIS a été simulée pour trouver les valeurs optimales des épaisseurs et voir leurs influences sur les caractéristiques électriques du dispositif solaire.

Dans le premier chapitre, un rappel de quelques notions sur le rayonnement solaire et son application dans le domaine photovoltaïque, les éléments de base nécessaires à la compréhension du fonctionnement d'une cellule photovoltaïque au silicium ainsi que leurs caractéristiques principales ont été énoncés. Enfin, les pertes fondamentales et technologiques limitant le rendement d'une cellule sont exposées pour arriver aux mécanismes de recombinaison.

Le deuxième chapitre traite les propriétés physiques du ternaire  $\text{CuInSe}_2$ , à savoir sa structure cristalline, ses propriétés optiques et électriques. Les défauts intrinsèques et extrinsèques rencontrés dans ce matériau sont énumérés. Ensuite, les principaux éléments qui constituent la cellule solaire à base de  $\text{CuInSe}_2$  sont exposés afin de comprendre le principe de base du fonctionnement de tels dispositifs.

Les connaissances fondamentales sur le fonctionnement de tels dispositifs à base de CIS nous amène au chapitre trois, où l'influence des trois couches constituant une cellule solaire à base de  $\text{CuInSe}_2$  à savoir la couche absorbante CIS, la couche tampon CdS et la couche anti reflet ZnO (épaisseurs et dopage) sont étudiées par la simulation. Le logiciel SCAPS-1D a été utilisé dans le but de concevoir une structure optimale avec un rendement de collecte optimal.

Les perspectives d'amélioration sont nombreuses, concernant la couche fenêtre ZnO, la couche tampon CdS et l'absorbeur CIS lui-même. Par exemple, l'amélioration de la transparence de la couche tampon dans l'ultraviolet permettrait d'augmenter le photo courant. On peut aussi procéder au remplacement des couches de CdS par des couches dont la bande interdite est beaucoup plus grande ( $> 2,4$  eV), et qui permet aussi de se passer de l'utilisation du cadmium toxique dans la filière CIS. La largeur de la bande interdite des cellules solaires à base de CIS, d'environ 1,02 eV, n'est pas optimale pour la conversion photovoltaïque, la valeur théorique optimale se situant autour de 1,5 eV, avec des rendements approchant les 30 %. Ainsi, l'augmentation de la bande interdite des absorbeurs CIS de 1 à 1.5 eV, par ajout de Ga, d'Al ou de S, pourrait être la clé pour de nouvelles cellules solaires 2<sup>ème</sup> génération.

## **Résumé**

Dans un contexte global de la diversification de l'utilisation des ressources naturelles, le recours aux énergies renouvelables et en particulier le solaire photovoltaïque se fait de plus en plus. A ce titre, le développement d'une nouvelle génération de cellules photovoltaïques à base de  $\text{CuInSe}_2$  semble prometteur. Ce mémoire porte sur le  $\text{CuInS}_2$  qui appartient à la famille des composés ternaires de forme chalcopyrite. Dans le domaine photovoltaïque, les études les plus récentes ont été la plupart du temps consacrées aux couches minces, dues à leurs grandes perspectives dans le secteur des modules photovoltaïques à grandes surfaces. Sa structure cristalline, ses propriétés optiques et électriques ainsi que les défauts intrinsèques et extrinsèques rencontrés dans ce matériau font de lui un matériau prometteur pour la recherche scientifique. Le logiciel SCAPS-1D a été utilisé dans cette étude afin de modéliser une cellule solaire à base de CIS tout en optimisant ses caractéristiques électriques en particulier l'efficacité du dispositif solaire.

**Mots clés** : cellule solaire, couches minces, CIS, propriétés optiques et électriques, rendement

## **Abstract**

In a global context of diversification of the use of natural resources, recourse to renewable energies and in particular solar photovoltaic is made more and more. As such, the development of a new generation of  $\text{CuInSe}_2$ -based photovoltaic cells seems promising. This thesis focuses on  $\text{CuInS}_2$ , which belongs to the family of ternary compounds in the chalcopyrite form. In the photovoltaic field, the most recent studies have been mostly devoted to thin films, due to their great prospects in the sector of photovoltaic modules with large surfaces. Its crystalline structure, its optical and electrical properties as well as the intrinsic and extrinsic defects encountered in this material make it a promising material for scientific research. SCAPS-1D software was used in this study to model a CIS-based solar cell while optimizing its electrical characteristics, in particular the efficiency of the solar device.

**Key words**: solar cell, thin films, CIS, optical and electrical properties, efficiency.