

Chapitre 4

Simulation numérique de la cellule CIS sur SCAPS-1D.

Les matériaux utilisés dans les applications photovoltaïques peuvent être produit dans une large variété de formes cristallines et polycristallines, bien que les matériaux cristallins ont montré de très hauts rendements de conversion, mais leur coût de production reste encore relativement élevé. Plusieurs matériaux polycristallins ont gagné récemment de plus en plus d'attention à cause de leurs performances, stabilité et leur faible coût de production. Parmi ces matériaux le CuInSe_2 est considéré comme l'un des choix les plus appropriés vu les bonnes propriétés optiques qu'il présente.

Malgré les plus hautes efficacités atteintes en matière de conversion photovoltaïque (> à 19 %) les cellules à base de CuInSe_2 sont toujours en amélioration et leurs propriétés électriques ne sont pas complètement comprises et font l'objet de beaucoup de sujets de recherche afin d'augmenter leurs performances.

La meilleure façon de mieux comprendre les mécanismes de fonctionnement de ces dispositifs tels que les courants de transport, la génération électron-trou et les phénomènes de recombinaison est la construction de modèles numériques pour la simulation. Ceci permet d'élucider les processus qui limitent les performances de la cellule et de donner une conception optimale des structures à la base de ces dispositifs.

Dans ce chapitre nous introduisons le concept de simulation numérique des semi-conducteurs, particulièrement l'application sur les cellules solaires du type CuInSe_2 en utilisant le logiciel de calcul SCAPS-1D, développé spécialement pour la simulation des cellules à base de CIS et CdTe. Les caractéristiques de la cellule utilisée sont similaires à celles qui ont atteint des records en matière de rendement photovoltaïque.

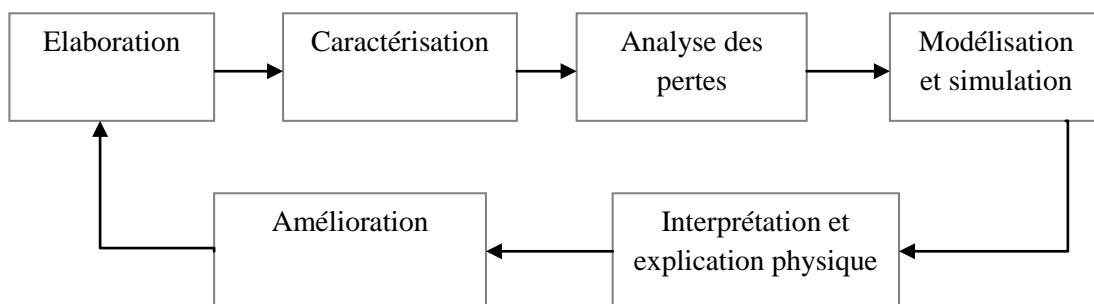


Figure 4.1 : Rôle de la modélisation dans l'amélioration des performances des cellules solaires.

4.1. Aperçu théorique :

Le logiciel de simulation procède par la résolution des trois équations fondamentales d'un semi-conducteur, l'équation de poisson et les équations continuité [55] :

$$\nabla \cdot \varepsilon \nabla \phi = -q(p - n + N_{D^+} - N_{A^-}) \quad (4.1)$$

$$\nabla \cdot \vec{J}_n = q(R - G) + q \frac{\partial n}{\partial t} \quad (4.2)$$

$$\nabla \cdot \vec{J}_p = q(R - G) + q \frac{\partial p}{\partial t} \quad (4.3)$$

Où ε est la constante diélectrique, ϕ le potentiel électrostatique, n et p les concentrations des porteurs libres, N_{D^+} et N_{A^-} sont les densités des accepteurs et donneurs ionisés. J_n et J_p les densités de courants des électrons et des trous, R est le taux de recombinaison et G le taux de génération électron-trou.

4.1.1. Phénomènes de transport :

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 :

$$J_n = q\mu_n nE + qD_n \nabla n \quad (4.4)$$

$$J_p = q\mu_p pE + qD_p \nabla p \quad (4.5)$$

Où μ_n et μ_p sont les mobilités des électrons et des trous respectivement. D_n et D_p sont les constantes de diffusion, et E est le champ électrostatique. Ces équations correspondent aux solutions des équations (4.1)-(4.3) et décrivent les phénomènes de transport dû au champ électrique et au phénomène de diffusion.

4.1.2. Photo-génération :

La densité de flux ϕ dans le matériau semi-conducteur est donnée par la relation [56] :

$$\phi(z) = \phi(z_0) \cdot e^{-(z-z_0)} \quad (4.6)$$

Où ϕ est la densité du flux c.-à-d. le nombre de photons par unité de surface et de temps (photons/cm².s), α est le coefficient d'absorption et z la profondeur de pénétration de la lumière. Dans le cas d'un semi-conducteur à bande de gap directe α est donné approximativement par l'expression [56] :

$$\alpha_0 \propto (E - E_g)^{1/2} \quad (4.7)$$

Le taux de génération est donné par la relation :

$$G(z) = -\frac{d\phi}{dz} = \alpha_i \phi(z_0). e^{(-\alpha_i(z-z_0))} \quad (4.8)$$

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

L'équation (4.8) décrit le taux de génération dû à une source lumineuse monochromatique. Dans la simulation, on suppose une illumination standard appelée « One Sun » qui correspond au spectre AM1.5. Le taux de génération totale est alors la somme des générations produites par chaque longueur d'onde.

4.1.3. 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 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.

Le calcul du taux de recombinaison associé à ces centres fait l'objet du modèle donné par Shokley-Read-Hall [57].

Le taux de recombinaison peut être donné par la relation :

$$R = \frac{\sigma_e \sigma_h v_t N_t (np - n_i^2)}{\sigma_n \left(n + n_i e^{\left(\frac{E_t - E_i}{kT} \right)} \right) + \sigma_p \left(p + n_i e^{\left(\frac{E_i - E_t}{kT} \right)} \right)} \quad (4.9)$$

Qui peut être simplifié par l'introduction des termes relatifs aux duré de vie de porteurs

$$\tau_n = 1/(N_t v_{th} \sigma_e) \quad \text{et} \quad \tau_h = 1/(N_t v_{th} \sigma_h)$$

Comme on pose : $n_1 = \sigma_n \left(n + n_i e^{\left(\frac{E_t - E_i}{kT}\right)} \right)$ et $p_1 = \sigma_p \left(p + n_i e^{\left(\frac{E_i - E_t}{kT}\right)} \right)$

L'expression (4.9) devient :

$$R = \frac{np - n_i^2}{\tau_n(n + n_1) + \tau_h(p + p_1)}$$

D'autres processus de recombinaison peuvent être considérés, mais leur taux est insignifiant par rapport au taux de recombinaison dans la zone de charge d'espace pour les matériaux polycristallins.

4.2. Les paramètres de la cellule utilisée, (ZnO/CdS/CuInSe₂) [60]:

On se propose de simuler les propriétés essentielles d'une cellule à base de CuInSe₂ 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-CuInSe₂.

Les paramètres donnés sur le tableau 4.1 sont propre aux cellules qui ont atteint les plus hauts rendements de conversion [59].

L'alignement des bandes sur les interfaces CdS/CIS et ZnO/CIS sont choisis de manière à avoir $|\Delta E_c|$ et $|\Delta E_v|$ inférieur à la différence entre les deux bandes de gap avec $\Delta E_c = 0.3$ eV et $\Delta E_v = -0.2$ eV, ce qui a été démontré par plusieurs études théoriques et expérimentales.

Les valeurs des mobilités des trous posées pour le CIS sont aux environs des valeurs les plus récentes mesurées sur des films minces de CuInSe₂ avec $\mu_e = 100$ cm²/Vs et $\mu_h = 3-22$ cm²/Vs.

Les valeurs des masses effectives sont posées par default égale à $0.2m_0$ et $0.8m_0$ pour chaque couche ce qui est en concordance avec les valeurs reportées dans les publications déjà faites sur le CIS.

Le tableau 4.1 montre les paramètres utilisées pour la simulation avec :

ϕ_{bn} et ϕ_{bp} sont les hauteurs des barrières $E_c - E_f$ et $E_f - E_c$, S est la vitesse de recombinaison en surface, W est l'épaisseur de la couche, μ_h et μ_e les mobilités des trous et des électrons, N_D et N_A les densités des dopants légers, E_g est la bande de gap, N_c et N_v sont les densités d'états

effectives, ΔE_c est la variation de la bande de gap entre deux couche adjacentes, N_{DG} et N_{AG} les densités de défauts donneurs et accepteurs et σ la section efficace électronique.

Tableau 4.1 [60] : Les paramètres de la cellule ZnO/CdS/CuInSe ₂ .			
Propriétés générales de la cellule	Contact avant		contact arrière
	ϕ_b (eV)	$\phi_{bn}=0$	
S_e (cm/s)	10^7		10^7
S_h (cm/s)	10^7		10^7
Réfectivité	0.05		0.8
Propriétés des couches	ZnO	CdS	CuInSe ₂
W (nm)	200	50	3000
ϵ/ϵ_0	9	10	13.6
μ_e (cm ² /s)	100	100	100
μ_h (cm ² /s)	25	25	25
$N_{D/A}$ (cm ⁻³)	$N_D=10^{18}$	$N_D=1.1 \cdot 10^{18}$	$N_A=2 \cdot 10^{16}$
E_g (eV)	3.3	2.4	1.15
N_c (cm ⁻³)	$2.2 \cdot 10^{18}$	$2.2 \cdot 10^{18}$	$2.2 \cdot 10^{18}$
N_v (cm ⁻³)	$1.8 \cdot 10^{19}$	$1.8 \cdot 10^{19}$	$1.8 \cdot 10^{19}$
ΔE_c (eV)		-0.2	+0.3
Les états liés aux défauts	ZnO	CdS	CuInSe ₂
N_{DG}, N_{AG} (cm ⁻³)	$D=10^{17}$	$A=10^{18}$	$D=10^{14}$
E_A, E_D (eV)	Mid-gap	mid gap	mid gap
W_G (eV)	0.1	0.1	0.1
σ_e (cm ²)	10^{-12}	10^{-17}	$5 \cdot 10^{-13}$
σ_h (cm ²)	10^{-15}	10^{-12}	10^{-15}

4.3. Les grandeurs technologiques d'une cellule solaire:

La caractéristique $I=f(V)$ noté aussi « I-V » (figure 4.2) est une fonction qui décrit le comportement de la photopile, et à partir de laquelle plusieurs paramètres relatifs à la cellule peuvent être calculés.

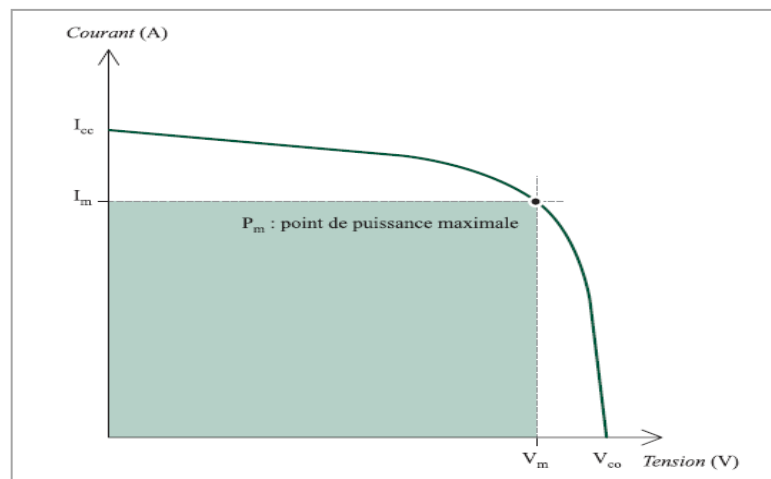


Figure 4.2 : Caractéristique I-V d'une cellule solaire.

○ **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 de la tension et de l'intensité du courant soit maximal, elle donnée par :

$$P_m = V_m \cdot I_m \quad (4.10)$$

○ **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 :

$$FF = \frac{V_m I_m}{V_{co} I_{cc}} = \frac{P_m}{V_{co} I_{cc}} \quad (4.11)$$

○ **Le rendement η :**

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

$$\eta = \frac{P_m}{P_{in}} = \frac{V_{co} I_{cc}}{P_{in}} \quad (4.12)$$

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

○ **La puissance crête P_m :**

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

○ **Le rendement quantique QE :**

C'est le nombre de paires électron-trou photo-générés par le nombre de photons incidents sur la cellule. Il est mesuré en fonction de la longueur d'onde. Dans une gamme allant de 300nm à 1300 nm. Il est donné par l'équation (2.13).

Le courant de court-circuit peut être calculé à partir du rendement quantique.

$$I_{cc} = \int_0^{\infty} QE(\lambda) \cdot \varphi(\lambda) dE \quad (4.13)$$

4.4. Le logiciel SCAPS-1D :

La simulation des cellules en couches minces est devenue de plus en plus utilisée ces dernières années, ainsi, plusieurs logiciels de calcul et de simulation ont été développés par la communauté des chercheurs dans ce domaine. On peut citer le logiciel AMPS-1D, PC-1D, ASA, SCAPS-1D, Silvaco etc.

SCAPS-1D acronyme de « *Solar Cell Capacitance Simulator one Dimension* » est un programme développé à l'université de Gent en Belgique avec Windows/CVI National Instruments par Marc Burgelman et al. Ce programme est conçu spécialement pour la simulation des dispositifs photoniques tels que les cellules au CdTe et CIGS.

Parmi les principaux avantages de SCAPS-1D :

- Les fichiers d'entrée sont accessibles à l'utilisateur en format texte tel que les données spectrales et les paramètres décrivant le dispositif.
- Possibilité d'introduire des interfaces et prise en compte du phénomène de recombinaison en celle-ci.
- Introduction de résistances en série, et obtention des caractéristiques capacité-tension et capacité –fréquence.
- C'est un logiciel qui présente une grande vitesse d'exécution.

4.5. Simulation, résultats et discussions :

Les figures 4.3.a et 4.3.b montrent les résultats de la simulation des caractéristiques I-V sur la cellule ZnO /CdS/CIS à l'obscurité et sous éclairement respectivement, avec :

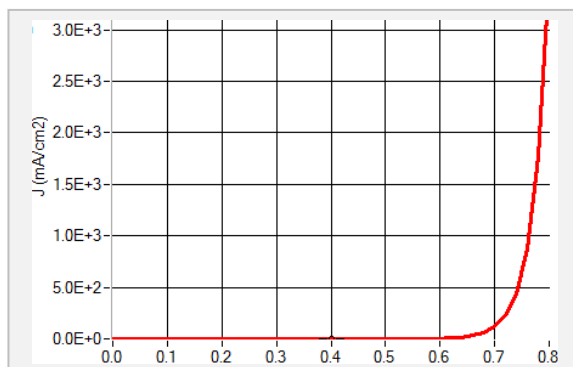


Figure 4.3.a : Caractéristique I-V à l'obscurité.

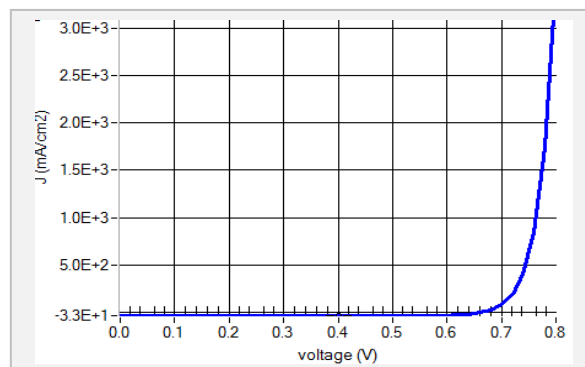


Figure 4.3.b : Caractéristique I-V sous éclairement.

Une tension à circuit ouvert $V_{co}=0.6617$ V, un courant de court-circuit $J_{cc}= 32.89$ mA/cm², un facteur de forme FF=81.30 et un rendement de conversion $\eta=17.69\%$.

Le rendement quantique de la cellule est donné sur la figure 4.4 montre un pic entre les valeurs 90 -100 % puis une diminution due aux pertes par recombinaison.

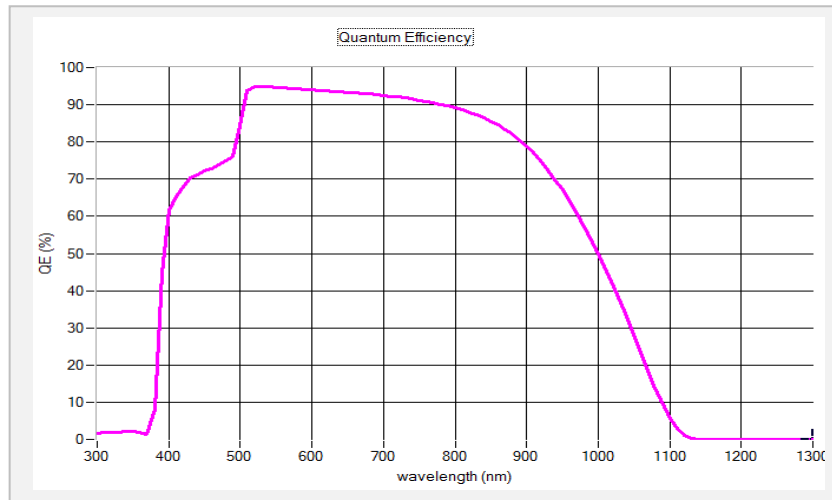


Figure.4.4 : Rendement quantique QE de la cellule ZnO/CdS/CuInSe₂.

4.5.1. Influence de la température de fonctionnement sur les paramètres de la cellule:

La température joue un rôle très important sur les performances de la cellule solaire. La valeur qui correspond à un fonctionnement optimale de la cellule est T=300 K. les résultats de la simulation montrent que le paramètre le plus affecté par la variation de la température est la tension de circuit ouvert V_{co} , son influence sur cette dernière est montrée sur la figure 4.5.

Tableau 4.2 : Simulations I-V pour différentes valeurs de la température.				
T (K)	V_{oc} (V)	J_{cc} (mA/cm ²)	FF	η (%)
300	0.6617	32.8906	81.30	17.69
310	0.6415	32.9087	80.83	16.98
320	0.6217	32.9266	79.88	16.35
330	0.6013	32.9446	79.05	15.66
340	0.5813	32.9229	78.28	15.00
350	0.5609	32.9816	77.42	14.32

Les valeurs obtenues pour la tension à circuit ouvert et le courant de court-circuit sont portées sur le tableau 4.2.

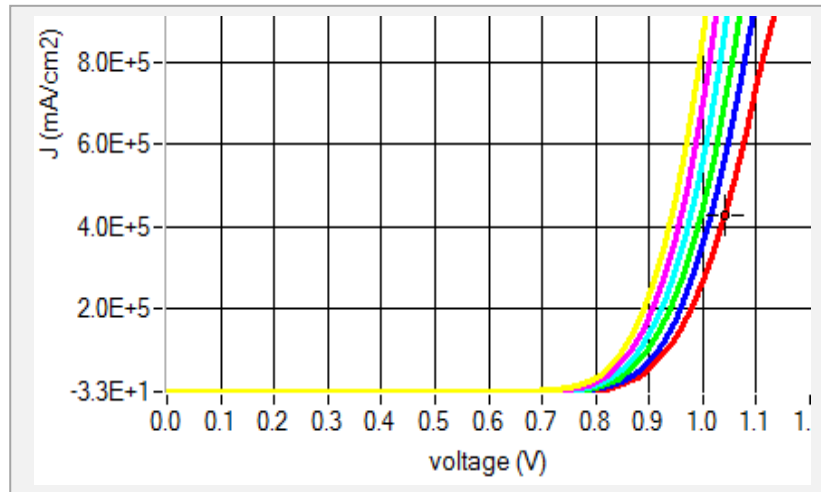


Figure 4.5: Les simulations I-V pour différentes valeurs de la température. T varie de 300K (rouge), à 350K (jaune) par pas de 10K.

En effet, lorsque la température augmente la bande de gap devient plus étroite et ceci accélère le phénomène de recombinaison des paires électrons-trous entre la bande de conduction et la bande de valence.

La forte réduction de V_{co} conduit à une diminution du facteur de forme FF ainsi que du rendement de conversion η de la cellule solaire.

4.5.2. Influence de l'épaisseur de la couche absorbante $CuInSe_2$:

L'effet de la variation de l'épaisseur de la couche absorbante CIS et sur les grandeurs I-V de la cellule est donné par le tableau 4.3.

Les deux valeurs V_{co} et J_{cc} diminuent lorsque l'épaisseur de la couche absorbante diminue car celle-ci absorbe de moins en moins de photons ayant les longues longueurs d'onde, ce qui influence négativement le taux de génération de paires électrons-trous.

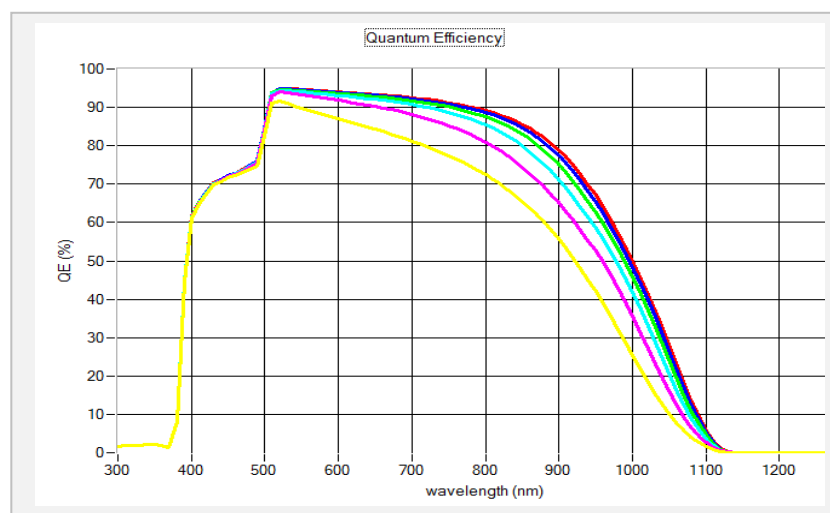


Figure 4.6: Rendement quantique QE pour différentes épaisseurs de la couche $CuInSe_2$. L'épaisseur varie de $3.0\mu m$ (rouge) jusqu'à $0.5\mu m$ (jaune) par pas de $0.5\mu m$.

L'effet de la réduction de l'épaisseur de la couche absorbante CIS sur le rendement quantique observé dans l'intervalle des longueurs d'onde $\lambda = 450$ à 1100 nm et est montré sur la figure 4.6.

Tableau 4.3 : Paramètres I-V pour différentes épaisseurs de la couche CuInSe₂.

Epaisseur de la couche CuInSe ₂ (μm)	V _{co} (V)	J _{cc} (mA/cm ²)	FF %	η (%)
3.0	0.6617	32.8906	81.30	17.69
2.5	0.6595	32.6243	81.18	17.47
2.0	0.6554	32.1956	80.92	17.07
1.5	0.6488	31.4742	80.76	16.49
1.0	0.6405	30.5196	80.11	15.36
0.5	0.6090	27.6702	76.98	12.97

Pour les 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 de centres de recombinaisons) ce qui réduit le nombre de paires électrons-trous générées et donc du rendement quantique QE.

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 $3.0 \mu\text{m}$ paraît être adéquate pour avoir un rendement optimal (17.69 %).

4.5.3. Influence de l'épaisseur de la couche tampon CdS :

Le meilleur matériau proposé pour la formation de l'hétérojonction photovoltaïque avec le CIS est le sulfure de Cadmium CdS, lequel est déposé souvent avec la technique CBD (*Chemical Vapor Deposition*), avec une épaisseur d'environ 30 à 60 nm [59].

Ici on fait varier l'épaisseur du CdS de 0.06 à $0.001 \mu\text{m}$. On observe une augmentation de V_{co} et J_{cc} à mesure que l'épaisseur du CdS diminue tel que montré sur le tableau 4.4.

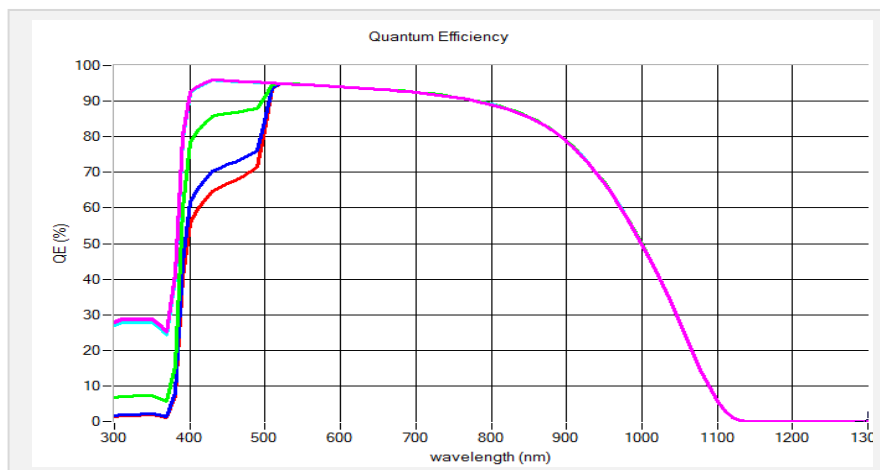


Figure 4.7: Rendement quantique QE pour différentes épaisseurs de la couche CdS. De $0.06 \mu\text{m}$ (rouge) à $0.001 \mu\text{m}$ (mauve).

Tableau 4.4 : Paramètres I-V pour différentes épaisseurs de la couche CdS.

Épaisseur de la couche CdS (nm)	V _{co} (V)	J _{cc} (mA/cm ²)	FF %	η %
0.06	0.6614	32.6005	81.28	17.53
0.05	0.6617	32.8906	81.30	17.69
0.025	0.6623	33.7256	81.36	18.17
0.005	0.6629	34.4464	81.36	18.58
0.002	0.6630	34.4574	81.38	18.59
0.001	0.6631	34.4597	81.38	18.60

La couche CdS est responsable d'une partie des pertes par absorption dans la cellule. Ainsi, lorsque son épaisseur augmente le taux de photons d'énergie ($h\nu > E_g$ CdS) qui y sont absorbés devient important, ce qui réduit le nombre de photons qui peuvent être absorbés par la couche CIS, d'où l'augmentation du rendement quantique avec la diminution de l'épaisseur de la couche tampon CdS (figure 4.7), particulièrement pour les longueurs d'onde $\lambda=300-400$ μm . Il paraît qu'une épaisseur de 10 μm de CdS donne un rendement optimal ($\eta=18.60$ %).

Conclusion

Dans le but de pouvoir améliorer les performances des dispositifs photovoltaïques, ceci nécessite parfois la présentation de modèles théoriques pour la simulation numérique. Dans ce cette partie on a introduit le concept de simulation numérique sur la cellule solaire à base de CIS, en prenant le soin de présenter un rappel succinct sur le modèle physique donné pour le phénomène de transport, la photo génération et la recombinaison, comme on a décrit brièvement le logiciel de calcul utilisé (SCAPS-1D).

En effet, les propriétés intrinsèques de la cellule sont très importantes et influencent largement les performances de celle-ci telle que la température de fonctionnement, les épaisseurs des couches composant la cellule. Ceci est illustré dans les caractéristiques I-V et les courbes obtenues pour le rendement quantique, avec un rendement de conversion optimal égal à 17.69% pour une couche absorbante de 3 μm , une épaisseur de la couche absorbante CdS de 0.05 μm et une température de 300 K.

Conclusion générale

L'un des principaux obstacles rencontrés pour que le photovoltaïque devienne plus populaire est le coût du watt produit. Il n'est pas encore concurrentiel à celui de l'électricité produite par les méthodes conventionnelles. Durant les dernières décennies, la course des différents groupes de recherches et de sociétés vers la diminution du prix du watt d'électricité produite par le photovoltaïque, conduit au développement de nouveaux semi-conducteurs considérés actuellement comme matériaux promoteurs pour les applications photovoltaïques. Parmi ces candidats, les couches minces de di-séléniure de Cuivre et d'Indium (CuInSe_2). Par rapport au silicium, les cellules solaires à base de ce semi-conducteur présenteraient une efficacité élevée, une excellente stabilité, une résistance aux irradiations et une durée de vie plus longue. Cependant, après plus de trente années de recherches et de développement les cellules à base de CIS viennent tout récemment de passer au stade industriel et commercial, avec par exemple, la mise au point en 2007 d'une unité de production avoisinant les 100 MW annuelle [34]. La question qui se pose, qu'est-ce qui doit être fait pour que la technologie CIS atteigne une grande échelle de production d'électricité photovoltaïque ?

D'une part, on doit satisfaire aux besoins de développement et accélérer les nouvelles techniques comprenant l'amélioration des procédés de dépôt qui faciliteront la production d'une grande masse de modules qui verra sans doute l'émergence d'une filière à bas coût au côté des filières de haut rendement, et utilisant de substrats souples et légers, de type plastique ou métal. D'autre part, des efforts doivent être fournis pour la compréhension des sciences fondamentales des matériaux. Des améliorations significatives en terme de rendement nécessite d'élucider la nature chimique et électronique des défauts qui limitent les performances des cellules, ceci peut contribuer à établir des modèles complets pour les processus de croissance des films minces $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$.

En outre, une compréhension fondamentale du rôle du sodium de la nature des joints de grains et des surfaces libres doit être développée, ainsi que du rôle de la couche tampon CdS, qui permettrait de trouver d'autres matériaux alternatifs comme partenaire du CIS pour la formation de l'hétérojonction, ayant une bande de gap plus large et ne contenant pas de Cadmium, ce sont autant de défis à relever pour les chercheurs sur des bases fortement pluridisciplinaires.

Finalement, les rendements atteints par les cellules CIS et les performances dont il a fait preuve font de lui l'un des matériaux qui contribueront fortement au potentiel énergétique solaire du futur.