

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université Des Frères Mentouri - Constantine
Faculté des Sciences de la Technologie
Département d'Electronique

N° d'ordre :.....

Série :.....

THESE

*Présentée en vue de l'obtention du diplôme de
Doctorat en Sciences en Electronique*

Option : Semi-conducteurs en biomédecine

Présentée par :

Naïma TOUAFEK

Intitulée

**Contribution à l'étude d'une cellule solaire en
couches minces à base de $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$**

Soutenu le : 15 / 06 / 2015

Devant le jury composé de:

Pr. A. TELIA	Professeur	Université des Frères Mentouri	Président
Pr. R. MAHAMDI	Professeur	Université de Batna	Rapporteur
Pr. T. BOUCHEMAT	Professeur	Université des Frères Mentouri	Examineur
Pr. A. BENHAYA	Professeur	Université de Batna	Examineur
Pr. H. BOURIDAH	Professeur	Université de Jijel	Examineur
Pr. M. S. AIDA	Professeur	Université des Frères Mentouri	Invité

Remerciements

Rien que grâce à Dieu et son grand pouvoir que la présente thèse a pu voir le jour après le noir

Avant tout, il me paraît convenable de préciser qu'au départ de cette recherche, ce sujet était proposé par Monsieur AIDA Med Salah, Professeur à l'université des Frères Mentouri- Constantine, dont l'objectif était de mener un travail de simulation et de réalisation d'une cellule solaire à base de CuInSe_2 . Après quatre ans de recherche et avec le départ du professeur AIDA Med Salah (mis en disponibilité), que je remercie beaucoup de m'avoir donné le « virus » du photovoltaïque, Monsieur MAHAMDI Ramdane a accepté de prendre la responsabilité et de poursuivre le chemin de la recherche avec moi malgré les difficultés rencontrées. Sachant que, vu les contraintes et les difficultés rencontrées pour effectuer la partie expérimentale, le thème initial a été modifié.

J'exprime mes remerciements les plus distinguées au directeur de thèse, Monsieur R. MAHAMDI Professeur à l'université de Batna. Je lui serai éternellement reconnaissante d'avoir accepté malgré les difficultés de m'encadrer. Ses encouragements, sa patience et sa disponibilité ainsi que sa générosité ont été des atouts supplémentaires pour la réussite de ce travail. Même dans les moments les plus difficiles il a su trouver les mots pour me recadrer et me donner l'envie de persévérer. Merci infiniment.

Pour l'honneur qu'il m'a accordé, en acceptant de présider mon jury de soutenance, je remercie sincèrement Monsieur A. TELIA, Professeur à l'université de Frères Mentouri-Constantine.

Je tiens à exprimer toute ma reconnaissance à M^{me} T. BOUCHEMAT, Professeur à l'université des Frères Mentouri-Constantine d'avoir accepté de consacrer de son temps et de son effort pour lire et évaluer ce manuscrit.

Mes remerciements vont aussi à Monsieur A. BENHAYA, Professeur à l'université de Batna pour avoir accepté d'évaluer ce modeste travail.

Je remercie également Monsieur H. BOURIDAH, Professeur à l'université de Jijel pour avoir accepté de faire partie de mon jury.

Mes remerciements concernent également Monsieur A. BOULOUBA Professeur à l'université de Sétif 1 d'avoir offert, à mon directeur de thèse, les logiciels qui m'ont permis de réaliser ce travail. C'est grâce à ces logiciels que ce travail a vu le jour.

Je n'oublie pas non plus mes amis mais je ne citerai pas de nom par peur de vexer certaines personnes par un oubli malheureux.

Finalement, merci à mes parents, mon frère, mes sœurs et mes neveux de m'avoir soutenu et supporté si longtemps avec autant d'amour et de patience. Je vous dois beaucoup.

Sommaire

Introduction générale	1
<i>Chapitre I : Etat de l'art des cellules photovoltaïques à base de CIGS</i>	
I. Introduction	7
II. Besoin aux énergies renouvelables	7
III. Rayonnement solaire	7
IV. Technologie photovoltaïque	9
IV.1- Evolution des cellules solaires	9
IV.2- Cellules solaires en couches minces	10
IV.2.1- Couches minces de silicium (mono ou multi-cristallin et amorphe).....	11
IV.2.2- Couches minces de tellurure de cadmium (CdTe).....	11
IV.2.3 - Couches minces de di-séléniure de cuivre-Indium (CIS/CIGS)	12
V. Structure d'une cellule solaire	13
V.1 - Principe de fonctionnement	13
V.2 - Caractéristiques d'une cellule solaire photovoltaïque	15
V.2.1 - Courbe courant-tension	15
V.2.2 - Rendement quantique	16
VI. Cellules solaires à base de CIGS	17
VI.1 - Matériau CIS/CIGS	17
VI.2 - Propriétés électriques et optiques du CIS	18
VI.2.1- Propriétés électriques	18
VI.2.2- Propriétés optiques	18
VI.3. Structure de la cellule CIGS	23
VI.3.1. Substrat	23
VI.3.2. Contact arrière	24
VI.3.3. Absorbeur	25
VI.3.4. Couche tampon	25
VI.3.5. Couche fenêtre	26
VI.3.6. Jonction p-n	26
VII. Conclusion	27

Chapitre II : Présentation du modèle utilisé et des outils de simulation

I. Introduction	36
II. Méthodes de modélisation	36
II.1. Modélisation analytique	37
II.1.1. Modèle à une diode	37
II.1.2. Photocourant I_{ph}	39
II.2. Modélisation numérique des cellules solaires.....	46
III. Logiciels utilisés	47
III.1. AMPS-1D	47
III.1.1. Utilisation de l'AMPS-1D.....	48
III.1.1.1. Propriétés générales du dispositif et du matériau	48
III.1.1.2. Conditions environnementales	49
III.1.1.3. Paramètres de modélisation	49
III.1.2. Avantages et inconvénients de l'AMPS-1D	50
III.2. SCAPS-1D	51
III.2.1. Utilisation du SCAPS	51
III.2.1. Avantages et inconvénients du SCAPS.....	52
IV. Description des paramètres de simulation	52
IV.1. Structure étudiée.....	52
IV.2. Paramètres de modélisation	53
IV.2.1. Contact arrière	53
IV.2.2. Absorbeur CIGS	53
IV.2.3. Régions d'interfaces	54
V. Conclusion	57

Chapitre III : Influence des paramètres physiques et géométriques sur les performances de la cellule

I. Introduction	60
II. Influence de l'épaisseur du CdS	60
III. Influence de la couche absorbante CuInSe ₂	62
IV. Influence des gaps optiques du CuInSe ₂ et CdS	64
V. Influence du taux de Gallium	67
VI. Conclusion	70

Chapitre IV : Influence de la forme d'un gradient de gap sur la performance de la cellule CIGS

I. Introduction	75
II. Profils proposés	75
II.1. Profil proche du linéaire_	75
II.2. Profil de Fermi	76
III. Gradient de gap inverse	76
III.1. Influence de la distance de gradient de gap	77
III.2. Influence de l' E_{gfront}	79
IV. Gradient de gap normal	81
IV.1. Profil proche du linéaire	81
IV.2. Profil de Fermi	82
IV.2.1. Influence de β	83
IV.2.2. Point d'inflexion X_0	84
V. Comparaison	85
VI. Conclusion	87

Chapitre V : Influence des interfaces CdS/CIGS et CIGS/Mo sur les performances de la cellule

I. Introduction	90
II. Interface CdS/CIGS	90
II.1. Modèles de la couche de surface du CIGS	90
II.1.1. Surface du CIGS auto-inversée	90
II.1.2. Mélange du CdS et CIGS à l'interface	93
II.2. Influence des défauts excédentaires à l'interface CdS/SDL.....	94
II.3. Influence des défauts excédentaires à l'interface SDL/CIGS	95
II.4. Influence de l'élargissement de la bande interdite	97
III. Interface CIGS/Mo	98
III.1. Variation de la vitesse de recombinaison au contact arrière	99
III.2. Influence des paramètres caractéristiques de l'EBR	101
III.2.1. Hauteur de l'EBR	101
III.2.2. Epaisseur de L'EBR.....	103
IV. Conclusion	104
Conclusion générale	111

Liste des symboles

<i>Symbole</i>	<i>Signification</i>	
α	Facteur de forme	cd
β	Forme de profil	cd
Dopn	Dopage de la couche type n	cm ⁻³
Dopp	Dopage de la couche type p	cm ⁻³
E	Epaisseur du CIGS	μm
E _g	Gap d'énergie interdite d'un matériau	eV
FF	Facteur de forme d'une caractéristique courant-tension	s.d.
I	Courant de la cellule	A
I _{cc}	Courant de court-circuit	A
I _o	Courant de saturation	A
I _m	Courant au point de fonctionnement	A
I _{ph}	Photo-courant	A
J _{cc}	Densité du courant de court-circuit	A/cm ²
J _{ph}	Densité du photocourant	A/cm ²
K	Constante de Boltzmann	8,617×10 ⁻⁵ eV.K ⁻¹
L _n	Longueur de diffusion des électrons	cm
L _p	Longueur de diffusion des trous	cm
n	Facteur d'idéalité de la diode	cd
η	Rendement de puissance (rendement de conversion)	(%)
N _A	Dopage des accepteurs	cm ⁻³
N _D	Dopage des donneurs	cm ⁻³
N _c	Densité d'états au bord de la bande de conduction	cm ⁻³
N _v	Densité d'états au bord de la bande de valence	cm ⁻³
P _{in}	Puissance incidente	W.m ⁻²
P _{max}	Puissance maximale fournie par une cellule	W.m ⁻²
q	Charge élémentaire	1,602×10 ⁻¹⁹ C
R	Taux de recombinaison	cm ⁻³ s ⁻¹
G	Taux de génération	cm ⁻³ s ⁻¹
R _s	Résistance Série	Ω
R _{sh}	Résistance Shunt	Ω

T	Température	K
μ_n	Mobilité des électrons.	cm^2/Vs
μ_p	Mobilité des trous	cm^2/Vs
V_{co}	Tension circuit ouvert	V
V_m	Tension au point de fonctionnement	V
X_o	Point d'inflexion	μm
ϕ	Flux de Photons Incident à la longueur d'onde	$\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$
λ	Longueur d'onde	μm
χ	Affinité électrique	eV
ϵ_0	Permittivité du vide	$8,85 \times 10^{-12} \text{ F.m}^{-1}$
σ_n	Section de capture efficace des élections	cm^2
σ_p	Section de capture efficace des trous.	cm^2

Liste des abréviations

<i>Signe</i>	<i>Signification</i>
AM	Spectre d'irradiance solaire hors atmosphère
AMO	Masse atmosphérique (nombre d'air masse)
AMPS	Analyse des microélectroniques et structure photonique
a-Si	Silicium amorphe
CdTe	Tellure de Cadmium
CdS	Sulfure de cadmium
CIS	Séléniure de Cuivre et Indium
CIGS	Séléniure de Cuivre et Indium et de Gallium
EBR	Réflecteur d'électrons face arrière
E_{gback}	Gap du CIGS au contact arrière.
E_{gfront}	Gap du CIGS à la jonction p-n
EQE	Rendement Quantique Externe
GaAs	Arséniure de Gallium
IQE	Rendement Quantique Interne
Mo	Molybdène
ODC	Composé de défauts ordonnés
QE	Rendement Quantique.
TH	Couche mince (Thin Film).
uc-Si	Silicium microcristallin.
ZCE	Zone de Charge d'Espace
ZnO	Oxyde de Zinc
SDL	Couche de défauts de surface
SCAPS	Simulateur de capacité de la cellule solaire

Introduction générale

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

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 couteuse, d'autres matériaux apparaissent comme compétitifs au silicium, parmi eux, les semi-conducteurs à structure chalcopyrite, de la famille à base de CIS ($\text{Cu}(\text{In,Ga,Al})(\text{Se,S})_2$). En effet, ces composés ont des largeurs de bande entre 1 eV (CuInSe_2) et 3 eV (CuAlS_2) ce qui leur permet d'absorber la majeure partie du rayonnement solaire. 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 $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ qui est considéré comme le plus efficace parmi tous les dérivés à base de CIS [3].

Améliorer les rendements des cellules solaires reste actuellement l'objectif majeur des recherches, l'une des possibilités à atteindre cet objectif est le gap qui est considéré comme le paramètre le plus influant dans la mise au point des dispositifs à semi-conducteurs. Donc, afin d'obtenir de meilleurs rendements que le CuInSe_2 qui a une bande interdite relativement faible 1,02 eV [4], de composés quaternaires $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ noté CIGS sont formés par l'introduction du Gallium, qui se substitue partiellement à l'Indium, de façon à élargir sensiblement la bande interdite et améliorer ainsi, les propriétés physico-chimiques de ce matériau [5], ce qui le place dans la zone optimale du spectre solaire et lui permet de détenir le record de rendement de toutes les cellules solaires en couches minces 20,8% [6].

Le CIGS représenté sous la forme $\text{Cu}(\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x)\text{Se}_2$ est un composé de Cu-In-Ga-Se₂ avec de grandes propriétés optiques en raison des propriétés de ses composés [7]. La

dépendance de la bande interdite du CIGS de taux de Gallium (x) [8] permet de produire des absorbeurs avec une largeur de bande variant de 1,04 à 1,67 eV [9]. Cette qualité peut être utilisée pour obtenir différents gaps à différents profondeurs dans la couche CIGS c.à.d. des absorbeurs à gradient de gap qui peut être obtenu par un changement du rapport [Ga]/[In] pendant le processus de dépôt. Plusieurs études ont montré l'effet bénéfique d'un gradient de gap sur les performances de la cellule [10,11]. Ce dernier fournit des champs supplémentaires qui se construisent dans l'absorbeur (type p) de la cellule solaire CIGS et qui dépendent des valeurs du gap tout au long de l'épaisseur. Il est également, capable de minimiser l'effet de la vitesse de recombinaison [12], en aidant la séparation et le transport des électrons-trous photogénérés [13], et par conséquent, l'amélioration des performances de la cellule CIGS [11]. Donc, les performances de la cellule seront affectées par la forme de la variation du gap dans l'absorbeur. Ainsi, le profil de la bande interdite joue un rôle vital sur les performances de la cellule [14]. Le profil linéaire est couramment choisi par les chercheurs pour réaliser des cellules CIGS à gradient de gap, mais la difficulté de contrôler parfaitement le rapport [Ga]/[In], pendant le processus de dépôt, mène à une déviation inévitable du profil de gap ce qui affecte les performances de la cellule.

En outre, les cellules solaires à couches minces à titre d'exemple, ZnO/CdS/CIGS/Mo et ZnO/ZnS/CIGS/Mo sont constituées de plusieurs couches de différents semi-conducteurs et de métaux. Chaque matériau composant la cellule possède certaines propriétés physiques et chimiques, et chaque couche affecte les performances de la cellule d'une manière ou d'une autre. Les couches de ces dispositifs peuvent provoquer des contraintes, des défauts, des états d'interface, et des centres de recombinaison de surface. Dans les cellules solaires ZnO/CdS/CIGS/Mo les interfaces les plus influentes sont :

- L'interface CdS/CIGS: des études de la spectroscopie de photoélectrons X ou XPS (x-ray photoelectron spectroscopy) montrent la présence d'une couche très fine riche en Indium de type converti (type n) [14] à la surface du matériau CIGS de type p et qui possède un gap plus large que le CIGS. Cette couche qui contribue à l'amélioration des performances de la cellule [15] est identifiée comme étant une couche de défaut de surface ou SDL (Surface defect layer), de structure similaire au CIGS, au volume [16,17]. Donc, une analyse de ces défauts s'avère nécessaire afin de pouvoir optimiser les performances des cellules solaires CIGS.

- L'interface CIGS/Mo: réduire l'épaisseur de la couche active des cellules solaires est une technologie prometteuse qui permet d'économiser la matière, diminuer le temps de fabrication et l'énergie nécessaire pour produire les cellules solaires. Par conséquent, baisser le cout de production. Si cette épaisseur est fortement réduite, la région dépeuplée devient très proche au contact arrière, ce qui augmente la recombinaison des électrons et réduit les performances de la cellule. Afin de produire des absorbeurs très minces sans pertes importantes, le risque de recombinaison des porteurs au contact arrière doit être atténué. Ce risque peut être minimisé par une passivation du contact arrière à travers: une construction d'un champ électrique qui reflète les électrons, réflecteur des électrons face arrière ou EBR (Electron Back Reflector), dans le matériau ou par une réduction de la surface du contact arrière [18,19].

L'objectif de notre thèse vise à optimiser les paramètres physiques et géométriques de la cellule à base de CuInSe_2 , à déterminer l'influence du taux de Gallium sur les performances de la cellule CuInGaSe_2 , à étudier les tendances des performances de la cellule si une mauvaise linéarité se produit lors de dépôt. On vise également, à examiner l'influence de l'excès de défauts de la couche SDL ainsi que son gap sur les paramètres électriques de la cellule et enfin, à connaître l'impact de la vitesse de recombinaison à la surface arrière, ainsi que, l'effet de la hauteur de l'EBR et son épaisseur sur les performances de la cellule CIGS lorsque l'épaisseur de la couche active est réduite.

Bien que plusieurs méthodes aient été utilisées pour améliorer les performances des cellules solaires à base de CIGS, plusieurs questions restent sans réponse. En fait, la simulation peut nous aider à répondre à certaines d'entre elles afin de mieux comprendre le fonctionnement de ces dispositifs. Les outils utilisés dans notre travail sont la modélisation analytique et la modélisation numérique moyennant de deux logiciels AMPS-1D (Analyse des Microélectronique et structures photoniques) et SCAPS-1D (Solaire Capacité Simulateur) pour la contribution à l'étude de cellules solaires à couches minces à base de cuivre-indium-gallium di-séléniure (CIGS).

Le travail effectué est subdivisé en cinq chapitres complémentaires. Au niveau du chapitre I, nous exposerons le principe de fonctionnement des cellules solaires ainsi que les propriétés électriques et optiques du matériau CIGS.

Nous aborderons ensuite dans le deuxième chapitre d'une part, le modèle analytique utilisé pour simuler les performances de la cellule et d'autre part, les logiciels utilisés à savoir:

l'AMPS-1D et le SCAPS-1D, ainsi que la présentation de la structure et les paramètres des différentes couches utilisés dans la simulation.

Dans le chapitre III, nous allons optimiser, en premier lieu, par un programme en Matlab les paramètres géométriques et physiques des différentes couches constituant une cellule solaire à base de CuInSe_2 ainsi que l'influence du taux de Gallium (x) dans l'alliage sur les performances de la cellule.

Nous allons étudier, dans le chapitre IV l'effet de la forme d'un gradient de gap sur les performances de la cellule ZnO/CdS/CIGS par le biais de la simulation numérique en utilisant le logiciel AMPS-1D, où deux profils ont été proposés : profil proche du linéaire et profil de Fermi

Le chapitre V est consacré à l'étude des régions d'interface les plus importantes d'une cellule solaire CIGS. Tout d'abord, l'interface CdS/CIGS (la jonction n-p) où l'influence de défauts d'interfaces sur les performances de la cellule sera discutée. Puis, l'interface CIGS/Mo (contact arrière) où l'effet de la vitesse de recombinaison et l'effet du réflecteur d'électrons face arrière (EBR), quand l'épaisseur de la couche absorbante est réduite, sur les performances de la cellule seront étudiés.

Finalement, dans la conclusion, les principaux résultats sont résumés et des suggestions sont présentées pour des recherches futures.

Références bibliographiques

- [1] G. Masson, M. Latour, M. Reking, I. T. Theologitis and M. Papoutsis, « Global Market Outlook for photovoltaics », Technical report, EPIA, 2013.
- [2] M. A. Green, K. Emery, Y. Hishikawa and W. Warta, « Solar cell efficiency tables (version 41) », Prog. Photovolt., Vol.21, 2013.
- [3] S. Saji, Ik-Ho Choi and Chi-Woo Lee, « Progress in electrodeposited absorber layer for $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ (CIGS) solar cells », Associate Editor Takhir Razykov, 2011.
- [4] L. Ribeaucourt, G. Savidand, D. Lincot and E. Chassaing, « Electrochemical study of one-step electrodeposition of copper–indium–gallium alloys in acidic conditions as precursor layers for $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ thin film solar cells », Electrochimica Acta, Vol. 56, 2011, pp. 6628.
- [5] V. S. Saji, I. H. Choi, and C.W. Lee « Progress in electrodeposited absorber layer for $\text{CuIn}_{(1-x)}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ (CIGS) solar cells », Solar Energy, Vol.85, 2011, pp. 2666.
- [6] P. Jackson, D. Hariskos, R. Wuerz, W. Wischmann and M. Powalla, « Compositional investigation of potassium doped $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ solar cells with efficiencies up to 20.8% », Phys. Status Solidi RRL, Vol.8, 2014, pp. 219.
- [7] V. S. Saji, S. M. Lee and C. W. Lee, « CIGS solar cells by electrodeposition », Journal of the Korean Electrochemical Society, Vol. 14, 2011, pp.61.
- [8] W. N. Shafarman and L. Stolt, « $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ Solar Cells », In Antonio Luque and Steven Hegedus (editors), « Handbook of Photovoltaic Science and Engineering », chap. 13, John Wiley & Sons Inc., 2003, pp. 567–616.
- [9] CH. Huang, « Effects of Ga content on $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ solar cells studied by numerical modeling J. Phys. Chem. Solids », Vol. 69, 2008, pp. 330.
- [10] S. H. Song, K. Nagaich, E. S. Aydil, R. Feist, R. Haley and S. A. Campbell, « Structure optimization for a high Efficiency CIGS solar cell », Conference Record of the IEEE Photovoltaic Specialists Conference, 2010, pp. 2488.

- [11] J. Song, S. Li. Sheng, C. H. Huang, O. D. Crisalle and T. J. Anderson, « Device modeling and simulation of the performance of $\text{Cu}(\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x)\text{Se}_2$ solar cells », *Solid-State Electronics*, Vol. 48, 2004, pp. 73.
- [12] K. Decock, S. Khelifi and M. Burgelman. « Analytical versus numerical analysis of back grading in CIGS solar cells », *Solar Energy materials and solar cell*, vol. 95, 2011, pp. 1550.
- [13] A. Morales-Acevedo, « Variable band-gap semiconductor as the basis of new solar cells », *Solar Energy*, Vol. 83, 2009, pp. 66.
- [14] S. H. Song, K. Nagaich, E. S. Aydil, R. Feist, R. Haley and S. A. Campbell. « Structure optimization for a high Efficiency CIGS solar cell », *Conference Record of the IEEE Photovoltaic Specialists Conference*, 2010, pp.2488.
- [15] D. Schmid, M. Ruckh, F. Grunwald and H. W. Schock, « Chalcopyrite/defect chalcopyrite heterojunctions on the basis of CuInSe_2 », *Journal of Applied Physics*, Vol. 73, 1993, pp. 2902.
- [16] Y. Yan, K.M. Jones, J. Abushama, M. Young, S. Asher, M.M. Al-Jassim and R. Noufi, « Microstructure of surface layers in $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ thin films », *Applied Physics Letters*, Vol. 81, 2002, pp.1008.
- [17] Z. Li , X. Yu-Ming, X. Chuan-Ming, H. Qing, L. F. Fang, L. Chang-Jian and S. Yun, « Microstructural characterization of Cu-poor $\text{Cu}(\text{In, Ga})\text{Se}_2$ surface layer », *Thin solid Films*, Vol. 520, 2012, pp. 2873.
- [18] B. Vermang, V. Fjallstrom, J. Pettersson, P. Salomé and M. Edoff, « Development of rear surface passivated $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ thin film solar cells with nano-sized local rear point contact », *Solar Energy Materials and Solar cells*, Vol. 117, 2013, pp. 505.
- [19] W.W. Hsu et al., « Surface passivation of $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ using atomic layer deposited Al_2O_3 », *Applied Physics Letters*, Vol. 100, 2012, pp. 1-4.

Chapitre I :

Etat de l'art des cellules photovoltaïques

à base de CIGS

I. Introduction

L'énergie solaire est entrain de devenir l'une des principales sources d'énergie en remplaçant les combustibles fossiles en raison de son abondance. 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 sont l'objet de multiples recherches, en vu d'améliorer le rendement de conversion de ces dispositifs. Les principaux matériaux utilisés comme absorbeurs en couches minces sont le Si amorphe (a-Si), le Tellure de Cadmium (CdTe), l'Arséniure de Gallium (GaAs) et Séléniure de Cuivre et Indium (CIS) et sa variante le $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ (CIGS) qui est le sujet de notre étude.

Dans ce chapitre, nous allons expliquer le principe de fonctionnement des cellules solaires dans la mesure où celle ci est nécessaire pour la compréhension de ce travail, ainsi que la présentation des propriétés électriques et optiques du matériau sujet CIGS.

II. Besoin aux énergies renouvelables

Au rythme de consommation actuelle et avec le développement économique des pays émergents l'épuisement des ressources énergétiques conventionnelles, tels que les combustibles fossiles, n'est qu'une question de temps, ce qui rend la nécessité de développer les sources d'énergies renouvelables impérative.

On considère qu'une énergie est renouvelable, toute source d'énergie qui se renouvelle assez rapidement pour être considérée comme inépuisable. On distingue plusieurs types de sources d'énergies renouvelables dont l'énergie solaire est la source la plus importante. La conversion de cette énergie en électricité peut être effectuée de manière directe ou indirecte (voir figure (I.1)). Parmi ces conversions, la conversion photovoltaïque qui est considérée comme la plus jeune des énergies renouvelables parce qu'elle a l'avantage d'être non polluante, accessible, souple, fiable, silencieuse et n'entraîne aucune perturbation du milieu [1].

III. Rayonnement solaire

Le rayonnement moyen émis par le soleil est de $1,36 \text{ KW/m}^2$ hors atmosphère. Pour des conditions climatiques ainsi que pour la présence de certaines molécules dans l'atmosphère (O_3 , CO_2 , H_2O ...) ce rayonnement subit une atténuation et une modification de son spectre.

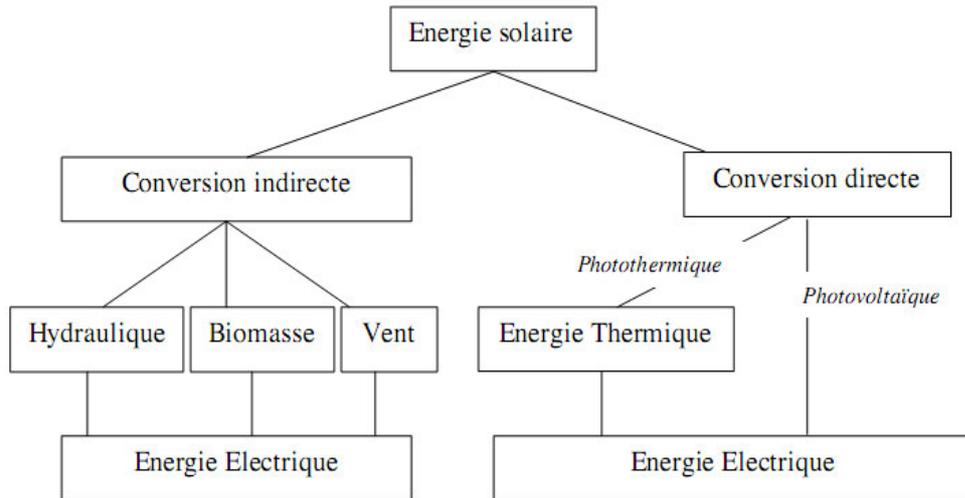


Figure (I.1): Conversion de l'énergie solaire en énergie électrique

L'intensité et la distribution spectrale qui arrive à la surface de la terre se réduit alors à 1000 W/m^2 avec un spectre décalé vers le rouge.

Pour pouvoir comparer les performances des cellules solaires et qualifier les différents spectres solaires utilisés, la notion d'air mass (AM), ou « masse atmosphérique » a été créée. Le nombre de masse (AM) est défini par l'équation (I.1):

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

Où θ est l'angle que fait le soleil avec son zénith (figure (I.2)).

La figure (I.2) montre le spectre d'irradiance solaire hors atmosphère (AM0) et sous AM1.5 global normalisé à 100 mW/cm^2 [1].

Afin de standardiser les méthodes de mesure, un spectre AM1.5G (Global) a été défini comme référence internationale. Il correspond à une masse d'air de 1.5 et un angle θ de 48.2° . Précisant que Global signifie que le spectre tient compte du rayonnement direct ainsi que du rayonnement diffus. Au sol, le rayonnement solaire a au moins deux composantes : une composante directe et une composante diffuse (rayonnement incident diffusé ou réfléchi par un obstacle : nuages, sol) formant le rayonnement global.

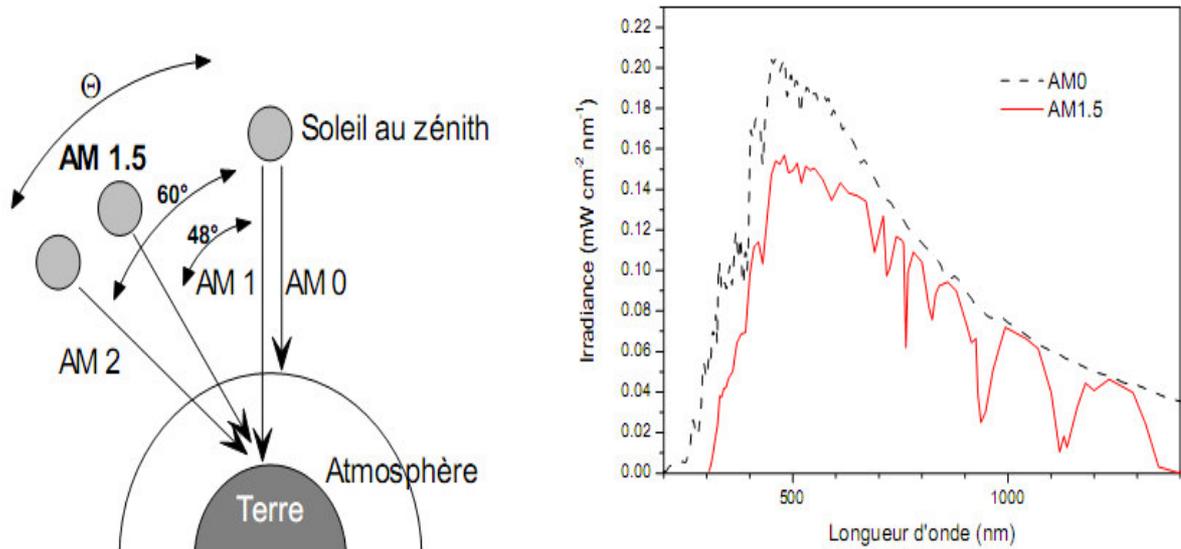


Figure (I.2): Définition de la norme AM ; spectre représentant l'irradiance solaire hors atmosphère (AM0) et sur terre (AM1.5 global).

IV. Technologie photovoltaïque

IV. 1 - Evolution des cellules solaires

En 1886 Fritts a écrit que les cellules solaires utilisent une source d'énergie qui est sans limites, sans couts et qui continuera à inonder la terre après que nous ayons fini de consommer nos réserves combustibles fossiles.

Les cellules solaires fonctionnent en convertissant directement l'énergie lumineuse en électricité par absorption des photons par des matériaux semi-conducteurs. L'utilisation des cellules solaires débutait avec le développement de la recherche spatiale. Mais le véritable investissement dans la technologie photovoltaïque et ses applications terrestres n'a commencé qu'après la crise énergétique des années soixante-dix.

La première technologie mettant en œuvre l'effet photovoltaïque est basée sur le silicium monocristallin ou multi-cristallin découpés en plaquettes à partir de lingots. Elle constitue actuellement l'essentiel de l'industrie photovoltaïque, voire plus de 80% de la production mondiale [2]. Bien qu'il soit un matériau très abondant sur terre sous forme de silice, parfaitement stable et non toxique, le silicium nécessite une énergie intensive pour le purifier et le cristalliser ce qui rend sa méthode de production très énergivore et donc, très couteuse. Cela a donné naissance à une nouvelle technologie basée sur les couches minces, dont l'objectif est

d'atteindre à la fois un meilleur rendement des cellules et une réduction des coûts de fabrication et d'utilisation des matériaux. De ce fait, l'intérêt commercial commence à changer vers les cellules à couche mince [3].

Le principe des cellules en couches minces est d'utiliser un matériau absorbeur ayant un coefficient d'absorption optique élevé par rapport au Si cristallin. Les principaux matériaux utilisés comme absorbeurs en couches minces sont l'a-Si, le $\mu\text{c-Si}$, le CdTe, le $\text{Cu}(\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x)\text{Se}_2$ (CIGS) et le GaAs. Les couches minces permettent également de réaliser des interconnexions monolithiques, ce qui n'est pas possible avec du Si cristallin. Les interconnexions monolithiques permettent d'obtenir des modules sur un seul substrat, et de fabriquer toutes les cellules du module simultanément.

Récemment, des cellules solaires impliquant des couches minces organiques sont également développées. Néanmoins, la stabilité dans le temps et les rendements de ce type de cellule ne sont pas encore assez importants pour permettre un développement industriel. Par ailleurs, d'autres technologies utilisent des concepts physiques différents de celui des cellules à base de silicium cristallin et des cellules en couches minces. On trouve parmi les plus prometteuses, les cellules à colorants (cellules de Grätzel), dont le principe de conversion s'inspire du mécanisme de la photosynthèse, qui présentent des rendements de 12 % en laboratoire [4]. En outre, l'utilisation des nanotechnologies dans les cellules solaires est déjà présente aujourd'hui, dans les nouvelles cellules solaires organiques et autres nanostructures, ainsi que dans les cellules solaires en silicium cristallin classiques afin de rendre les panneaux solaires plus efficaces qu'à l'heure actuelle.

IV. 2. Cellules solaires en couches minces

Une couche mince ou TF (Thin Film) est un revêtement dont l'épaisseur peut varier de quelques couches atomiques à une dizaine de micromètres. La technologie des cellules solaires en couches minces ne dépose que la quantité de matériau photosensible efficace pour absorber l'essentiel du rayonnement solaire (quelques microns d'épaisseurs suffisent), ce qui rend ces cellules peu gourmandes en matériaux de fabrication et facilement adaptables aux supports flexibles. Cependant, le problème majeur est le rendement moindre de ce type de cellules et la toxicité de certains éléments (cadmium) utilisés pour leur fabrication.

La technologie en couches minces, qui utilise des couches absorbantes polycristallines ou

amorphes, concerne actuellement le a-Si hydrogéné, le GaAs, le CdTe, CuInSe₂ et sa variante Cu(In,Ga)Se₂ (CIGS). Ces matériaux sont considérés comme les meilleurs choix pour la production des cellules solaires à couches minces en raison de leurs bonnes propriétés optiques et de leurs bandes interdites souhaitables à l'absorption du spectre solaire [5,6]. Les couches minces commencent à pénétrer le marché mondial du photovoltaïque, elles ont atteint en 2012 le 15%, ce qui confirme leur l'intérêt en tant que solution photovoltaïque [2]. Actuellement, il existe trois principales concurrentes technologies couches minces photovoltaïques à base de a-Si, CdTe, et CIGS disponibles pour la production d'énergie terrestre à grande échelle et d'autres applications électroniques grand public.

IV.2.1 - Couches minces de silicium (mono ou multi-cristallin et amorphe)

Dans la technologie TFSi basée sur le silicium non cristallisé, le silicium amorphe peut être directement déposé sur un substrat de verre à basse température par un procédé de dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma ou PECVD (Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition) [7]. Le processus de fabrication est très souple. Il permet d'une part, d'abaisser significativement les coûts de productions et d'autre part, de générer de grandes surfaces unitaires, de l'ordre du mètre carré, en un seul tenant. En fait, le silicium amorphe, possédant un coefficient d'absorption optique plus élevé et meilleur que celui du silicium monocristallin ce qui réduit l'épaisseur de silicium nécessaire à la fabrication des cellules solaires à quelques microns, réduisant par conséquent et considérablement, les coûts de matière première et le risque de pénurie liée au manque de silicium. Cependant et malgré les rendements de conversion faibles de 6% à 7% (limités par le taux de recombinaisons très élevé), plusieurs possibilités existent pour améliorer le rendement de ces cellules. Des matériaux constituant des jonctions microcristallines ($\mu\text{c-Si}$) peuvent être ajoutés ou bien par l'incorporation de germanium pour former un $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ ($0 \leq x \leq 1$) couches minces. L'introduction de ces matériaux innovants est prometteuse à long terme pour la technologie TFSi, bien que les questions liées à la stabilité et à la dégradation à long terme demeurent la principale préoccupation pour ce matériau.

IV.2.2 - Couches minces de tellure de cadmium (CdTe)

Jusqu'à une date récente, la filière CdS/CdTe représentait l'approche la plus prometteuse des cellules solaires à couches minces. Le CdTe est un semi-conducteur à bande interdite directe $E_g = 1,45$ eV, qui est une valeur idéale pour la conversion photovoltaïque du spectre solaire puisque elle s'approche de l'optimum théorique $E_g = 1.4$ eV [8]. En raison de la méthode de

fabrication relativement facile et un bon coefficient d'absorption dans le spectre solaire visible, le rendement de la cellule CdS / CdTe a été amélioré significativement au cours de la dernière décennie. En fait, le rendement de conversion maximal est de 18.7% [9]. Comparé aux autres technologies couches minces, le CdTe est plus facile à déposer et donc, plus approprié à la production de module PV de surface importante. Toutefois, l'inconvénient majeur actuel repose sur la toxicité reconnue du Cadmium, qui empêche les tentatives de développement de cette filière, bien qu'il a été démontré que les risques environnementaux liés aux cellules PV en CdTe sont minimes [10].

IV.2.3 - Couches minces de di-séléniure de cuivre-indium (CIS/CIGS)

Malgré leur nature polycristalline, les cellules solaires en couches minces à base de Cu(In,Ga)Se_2 (CIGS) ont atteint étonnamment un rendement de conversion élevé qui s'approche de 20.8 % [11] au laboratoire pour un ensoleillement AM1.5 et de 25 % par simulation [12]. Ces résultats positionnent le CIGS comme le CdTe au dessus des cellules de silicium en termes de compromis coût-rendement. Bien que la filière chalcogénure ternaire (CIS) et quaternaire (CuInGaSe_2) et ses nombreuses variantes n'a pas eu la croissance explosive du CdTe, elle reste encore la plus pertinente pour se lancer aujourd'hui dans les couches minces car elle combine le meilleur compromis de haut rendement, de bonne stabilité et de faible coût potentiel sans offenser l'environnement. Les principales améliorations sont venues de l'élargissement de la bande interdite du CuInSe_2 par l'utilisation d'alliages du type CuInSe_2 et du CuGaSe_2 (diséléniure de cuivre et de gallium), avec des gaps, respectivement, 1.02 eV et de 1,67 eV [13, 14]. En plus cette filière possède certaines caractéristiques exceptionnelles telles que: le coefficient d'absorption qui a presque le même seuil que celui du c-Si mais il est 100 à 1000 fois plus fort dans la gamme 1,1 à 2,6 eV, ce qui permet une épaisseur d'absorbeur de 1 à 2 μm , la longueur de diffusion des porteurs minoritaires particulièrement liées aux applications photovoltaïques, et surtout la tolérance aux défauts qui permet une production à très grande échelle.

En outre, il existe d'autres matériaux basés sur des alliages et qui sont extrêmement performants, mais aussi extrêmement chers (comme l'arséniure/indium de gallium InGaAs). Ils sont utilisés beaucoup plus pour les applications spatiales à l'aide de concentrateurs de lumière.

V. Structure d'une cellule solaire

La structure la plus simple d'une cellule solaire, représentée sur la figure (I.3), comporte une jonction entre deux zones dopées différemment (p-n) d'un même matériau (homo-jonction) ou entre deux matériaux différents (hétérojonction), la moins épaisse étant soumise au flux lumineux. Chacune des régions est reliée à une électrode métallique au moyen d'un contact ohmique de faible résistance.

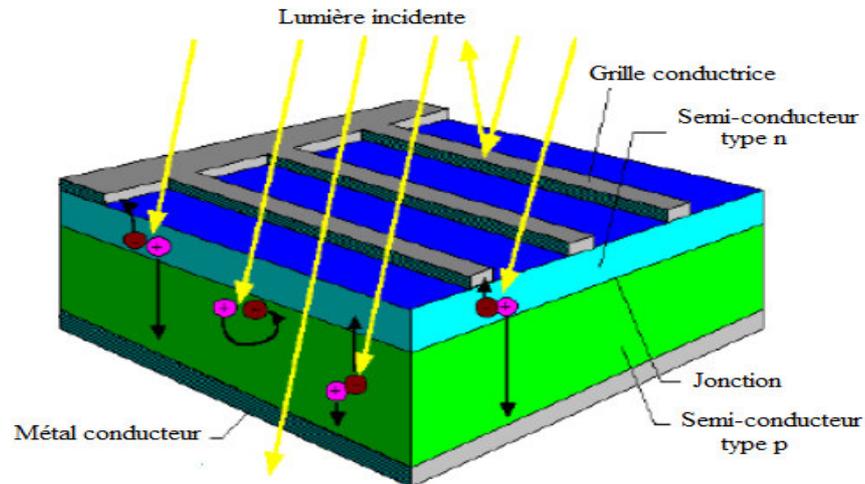


Figure (I.3): Structure la plus simple d'une cellule solaire.

V.1 - Principe de fonctionnement

L'effet photovoltaïque utilisé dans les cellules solaires permet de convertir directement l'énergie lumineuse des rayons solaires en électricité 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.

Le composant de base d'une cellule solaire est la couche absorbante, généralement de type p, où la conversion des photons, ayant une énergie supérieure à l'énergie de la bande interdite du semi-conducteur utilisé, en paires électron-trou se produit. Cette couche doit être capable d'absorber une grande partie du spectre solaire. Pour former une diode p-n une couche semi-conductrice de type n est nécessaire pour établir un champ électrique qui repousse les électrons vers la zone n et les trous vers la zone p. Cette couche doit être mince et fortement dopée afin d'obtenir un champ électrique suffisant dans la zone de charge d'espace (ZCE). Lorsque l'absorption des photons se déroule dans la ZCE, les paires électron-trou photo

généérées seront immédiatement dissociées par le champ électrique et ils génèrent ainsi, un photo-courant de génération [14]. Parallèlement, les porteurs minoritaires, trous générés dans la région n et électrons dans la région p, créent un gradient de concentration et se diffusent dans le matériau. Ces porteurs atteignent la ZCE, où le champ électrique leur fait traverser la zone de déplétion, afin d'atteindre la région où ils deviennent majoritaires : c'est le photo-courant de diffusion. Ces deux contributions s'ajoutent pour créer un photo-courant résultant I_{ph} [7]. Bien sûr, certains des électrons photo-excités seront perdus pour cause de génération-recombinaison dans la ZCE ou dans la région quasi-neutre, surtout si la photo-excitation a lieu loin de la jonction. Idéalement, la couche n (couche tampon ou couche émetteur) présente un dopage beaucoup plus élevé que l'absorbeur (type p), de telle sorte que la plupart de la région de charge d'espace s'étend dans l'absorbeur afin d'avoir une grande probabilité de collecte des porteurs libres. En outre, la largeur de la bande interdite de la couche tampon doit être large, de telle sorte que la majeure partie du rayonnement incident peut être transmise à l'absorbeur. En raison de la décroissance exponentielle de l'intensité lumineuse provoquée par l'absorption, les photons incidents sont alors absorbés principalement dans la partie avant de l'absorbeur où la plupart des transporteurs sont générés.

Pour le transport efficace des porteurs photo-générés, les contacts ohmiques avant et arrière avec des conductivités élevées sont nécessaires. Le contact avant (au-dessus de la couche tampon, également appelée couche "fenêtre") doit être transparent au rayonnement incident aussi que possible. Le contact arrière est généralement constitué d'un film métallique opaque pour assurer une réflexion maximale.

Précisant que le photo-courant est un courant de porteurs minoritaires proportionnel à l'intensité lumineuse. Ce courant s'oppose au courant de diode, appelé courant d'obscurité I_{obs} , qui résulte de la polarisation du composant. Le courant résultant, I , est obtenu par l'équation suivante [15]:

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

Avec :

$$I_{obs} = I_0 \left(\exp\left(\frac{qV}{nKT}\right) - 1 \right) \quad (I. 3)$$

Où :

q : charge élémentaire ($q = 1,6.10^{-19}$ C), k : constante de Boltzmann ($k = 1,38.10^{-23}$ J.K⁻¹),
 T : température (K°), V : tension aux bornes de la jonction (V), I_0 : Courant de saturation en

inverse de la diode, n : le facteur d'idéalité de la diode, fonction de la qualité de la jonction (égal à 1 si la diode est idéale et égal à 2 si la diode est entièrement gouvernée par la génération / recombinaison).

La région de type n est maintenant chargée négativement alors que la région de type p est chargée positivement, cela engendre une tension photovoltaïque aux bornes du dispositif, plus un photo-courant résultant du processus déjà expliqué, donc nous avons une puissance photovoltaïque disponible pour le consommateur.

V.2 - Caractéristiques d'une cellule solaire photovoltaïque

Les deux principales caractéristiques d'une cellule solaire sont :

V.2.1 - Courbe courant-tension

Le tracé de la caractéristique I (V) de la cellule solaire découle de l'équation (I.2) est représenté sur la figure (I.4) qui montre la variation du courant en fonction de la tension (I - V) pour une cellule solaire typique. Sous obscurité, la courbe caractéristique est la même que celle d'une diode simple, et sous éclairage, la courbe est décalée vers le bas d'une valeur égale au photo-courant I_{ph} . I_{cc} et le V_{co} sont, respectivement, le courant de court-circuit et la tension du circuit ouvert.

- *Courant de court-circuit* : il est obtenu en court-circuitant les bornes de la cellule ($V=0$). Il correspond au photo-courant I_{ph} généré par le rayonnement. Pour une distribution spectrale donnée, ce photo-courant croît linéairement avec l'intensité d'illumination de la cellule, de la surface éclairée, de la longueur d'onde du rayonnement, de la mobilité des porteurs et de la température [16].

- *Tension en circuit ouvert* : si la cellule est laissée en circuit ouvert (courant nul), la tension mesurée aux bornes des électrodes est appelée tension de circuit ouvert V_{co} . C'est la tension qu'il faudrait appliquer à la diode dans le sens passant pour générer un courant égal au photo-courant I_{cc} [17]. Elle est donnée par la relation:

$$V_{co} = \frac{KT}{q} \ln \left(\frac{I_{cc}}{I_0} + 1 \right) \quad (I.4)$$

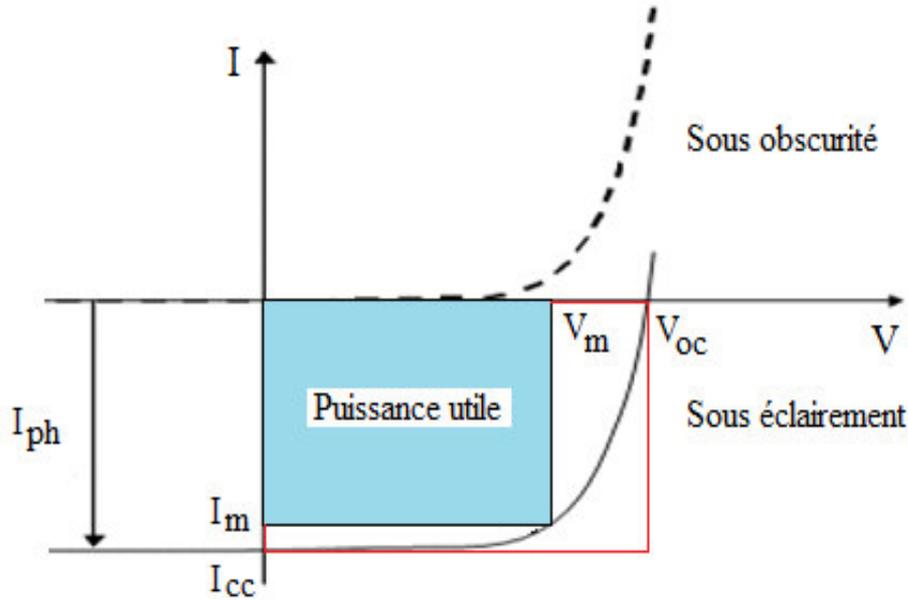


Figure (I.4) : Caractéristique d'une cellule photovoltaïque.

- *Facteur de forme* : le facteur de forme ou FF (Fill Factor) représente l'efficacité de la cellule solaire. C'est le rapport entre la puissance maximale débitée $V_m \cdot I_m$ (la surface du plus petit rectangle) et la puissance idéale $V_{co} \cdot I_{cc}$ (la surface du plus grand rectangle) [17]. Où V_m et I_m sont les valeurs de tension et du courant correspondant au point de fonctionnement pour lequel la puissance, qui est égale à $U \cdot I$, est maximale. Le FF, est donné par la relation suivante:

$$FF = \frac{V_m I_m}{V_{co} I_{cc}} \quad (I.5)$$

- *Rendement* : il est défini par le rapport entre l'énergie maximale délivrée par la cellule P_{max} et l'énergie lumineuse incidente P_{in} par unité de surface :

$$\eta = \frac{V_m I_m}{P_{in}} = \frac{FF V_{oc} I_{cc}}{P_{in}} \quad (I.6)$$

V.2.2 - Rendement quantique

Le rendement quantique décrit la probabilité, pour un photon incident d'une longueur d'onde donnée, de créer une paire électron-trou effectivement collectée par la cellule. Il s'exprime selon l'équation suivante :

$$QE(\lambda) = \frac{J_{ph}}{q\Phi_0(\lambda)} \quad (I.7)$$

Où $J_{ph}(\lambda)$ est le photocourant à la longueur d'onde λ , q est la charge d'un électron, $\Phi_0(\lambda)$ est le flux de photons incidents à la longueur d'onde λ .

Deux types de rendement quantiques sont souvent considérés dans le cas de cellules solaires :

- Le rendement quantique externe noté EQE (External Quantum Efficiency), qui prend en compte les effets de pertes optiques, comme la lumière non absorbée ou la lumière réfléchie.

- Le rendement quantique interne ou IQE (Internal Quantum Efficiency), il ne prend pas en considération les photons transmis (absorption incomplète) et réfléchis.

Le rendement quantique interne et le rendement quantique externe sont reliés par la relation suivante:

$$IQE(\lambda) = \frac{EQE(\lambda)}{1 - R(\lambda)} \quad (I.8)$$

$R(\lambda)$: coefficient de réflexion

Le rendement quantique, obtenu en fonction de la longueur d'onde des photons (λ), correspond au nombre d'électrons collectés relativement au nombre de photons incidents ayant une longueur d'onde donnée. En convoquant cette courbe avec le spectre d'illumination, on peut déterminer le courant généré dans la cellule. De plus, cette courbe est un bon outil pour essayer de cerner les couches ou les interfaces de la cellule solaire qui provoquent des pertes d'absorption. Le rendement quantique dépend essentiellement du coefficient d'absorption des matériaux utilisés, du potentiel d'ionisation, et de l'efficacité de la collecte.

VI. Cellules solaires à base de CIGS

VI.1 - Matériau CIS/CIGS

Le semi-conducteur $CuInSe_2$ appartenant au groupe I-III-VI₂, est un matériau composé de structure chalcopyrite et qui présente un grand intérêt pour la conversion photovoltaïque de l'énergie solaire [18,19]. C'est un semi-conducteur assez particulier. Il est composé d'atomes de sélénium gros et immobiles, d'indium plus petits, et surtout de cuivre baladeur. Ce dernier 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 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 [13] lui permet d'absorber une large gamme du spectre solaire, son coefficient d'absorption qui est très élevé dans le domaine du visible et du proche infrarouge; permet à une couche de CuInSe_2 avec une épaisseur de 1 à 2 μm 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 CIGS sont variées et la plus commune étant la coévaporation.

VI.2 - Propriétés électriques et optiques du CIS²

VI.2.1 - Propriétés électriques

Plusieurs chercheurs ont étudié les propriétés électriques du CuInSe_2 notamment l'identification et la caractérisation des défauts dans ce matériau. Des recherches ont montré que le type de conduction dans le semi-conducteur CuInSe_2 dépend essentiellement des rapports $[\text{Cu}/\text{In}]$ et $[\text{Se}/(\text{Cu}+\text{In})]$. Autrement dit, ce matériau peut présenter une conductivité de type n si il est riche en Indium avec un manque de sélénium ou de type p si il est pauvre en Indium avec un excès ou un manque de sélénium, et donc, on peut réaliser avec ce semi-conducteur des homo-jonctions et des hétérojonctions. Il présente des paramètres de maille et une affinité électronique compatibles avec ceux des matériaux utilisés dans la fabrication des autres couches constituant la cellule solaire à savoir : le CdS, l'ITO, le ZnO, etc. Sa stabilité électrique et thermique est excellente sous les conditions d'opérations c.-à-d. excellente résistance aux irradiations.

VI.2.2 - Propriétés optiques

Le rendement des cellules solaires dépend principalement de la lumière absorbée par la couche absorbante. Du point de vue technologique, la couche absorbante doit avoir un gap optimal pour absorber la plus large gamme des longueurs d'ondes du spectre solaire avec un coefficient d'absorption élevé. Les propriétés optiques des couches CuInSe_2 ont été largement étudiées par plusieurs groupes de recherche [20, 21].

- *Absorption optique*

Le CuInSe_2 et ses alliages sont considérés actuellement comme des matériaux prometteurs en tant qu'absorbants dans la conversion photovoltaïque. Le CuInSe_2 se distingue des autres matériaux photovoltaïques (CdTe , GaAs , CdS , etc.) par une bande interdite à transition directe de l'ordre de 1,02 eV [13] et un coefficient d'absorption α relativement élevé, ($\alpha > 10^5 \text{ cm}^{-1}$), le silicium cristallin : $1 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$, dans le domaine du visible et le proche infrarouge (figure (I.5)) [22], qui lui permet d'absorber la quasi-totalité du spectre solaire sur une profondeur de 1.5-2 μm [23].

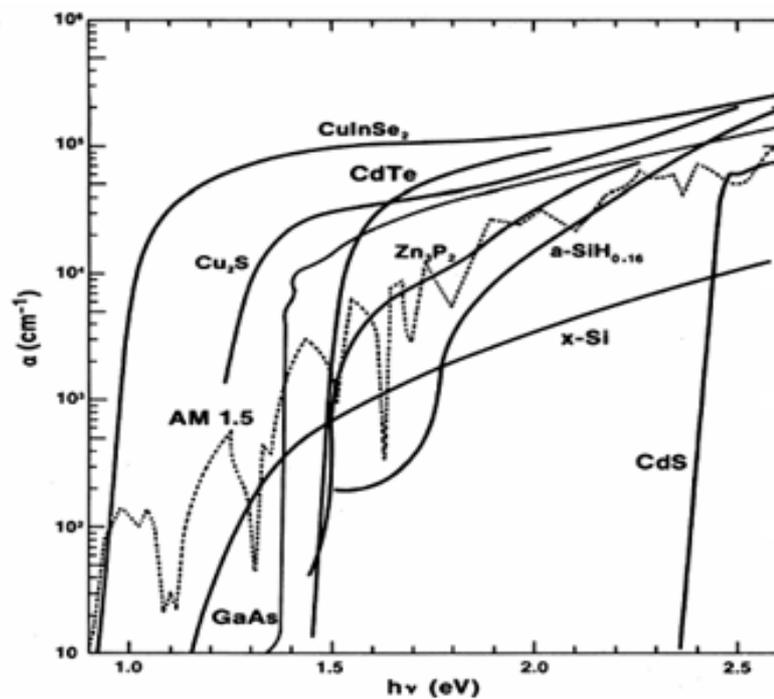


Figure (I.5): Spectre d'absorption du CuInSe_2 comparé à d'autres semi-conducteurs photovoltaïques [22].

- *Gap optique*

Les performances des cellules solaires augmentent lorsque la jonction est adaptée au spectre solaire en augmentant la largeur de bande interdite [24]. L'optimum théorique du gap d'un absorber pour une conversion optimale du spectre solaire pour les cellules solaires est d'environ 1,4 eV [25, 26]. Afin d'augmenter la largeur de bande du CIS vers l'optimum, on ajoute du Ga ou Al au CIS en gardant constant le nombre total d'atomes groupe III, ($\text{In} + \text{Ga}$) ou ($\text{In} + \text{Al}$).

Le changement d'une proportion d'Indium par le Gallium pour former de composé quaternaire $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$ améliore les propriétés physico-chimique de ce matériau et varie ainsi les paramètres de la cellule solaire [27]. Il permet d'augmenter la largeur de la bande interdite et par conséquent, obtenir de meilleur rendement que le CIS. Cette augmentation du gap a permis la fabrication des cellules solaires avec un rendement de 20,8 % [11], ce qui rend le CIGS ($\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$) le matériau le plus efficace parmi tous les dérivés à base de CIS [28].

Le CIGS est une solution solide de CuInSe_2 et CuGaSe_2 [29]. Cela rend sa bande interdite dépendante du rapport de concentration $x = [\text{Ga}]/([\text{In}]+[\text{Ga}])$, qui détermine le taux d'atomes de gallium qui remplacent les atomes d'indium dans la structure. La variation du gap du $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ en fonction de x , entre les valeurs du CIS (1.02 eV) [13] et du CGS (1.67 eV) [15], suit la relation [30]:

$$E_g(x) = 1.01 + 0.626x - 0.167x(1 - x) \quad (\text{I.9})$$

Le CIGS est donc, un matériau dont E_g peut être ajusté entre 1,01eV (CIS) et 1,67 eV (CGS) en fonction du taux de gallium. La valeur optimale d' E_g dépend de plusieurs facteurs. Du point de vue de l'absorption des photons, il est préférable d'avoir une valeur d' E_g réduite permettant d'absorber un spectre plus large (plus grandes longueurs d'onde). Il en résulte un courant plus important délivré par la cellule solaire (J_{cc}). Cependant, c'est la valeur d' E_g qui détermine la tension maximale délivrée par la cellule. Afin de maximiser le rendement de conversion, il est donc nécessaire d'obtenir un compromis idéal entre courant et tension. La plupart des résultats expérimentaux publiés dans le domaine des cellules CIGS montrent que les meilleurs rendements sont obtenus avec un gap d'environ 1,2 eV [31], ce qui correspond à un taux de Ga proche de 30%. Cette qualité peut être utilisée, non seulement pour optimiser le gap du matériau, mais aussi pour obtenir de différentes bandes interdites à différentes profondeurs dans la couche CIGS, profil de la bande interdite (band gap profiling).

En face arrière des cellules solaires (contact arrière), la vitesse de recombinaison de surface atteint des valeurs très élevées qui diminuent le rendement des dispositifs. Pour les cellules à base de silicium, il est possible de diminuer les recombinaisons au contact arrière par la réalisation d'un champ répulsif en face arrière ou BSF (Back Surface Field) par la réalisation d'un gradient de dopage [32]. Mais dans les cellules solaires à base de CIGS, le BSF peut être réalisé avec un gradient de gap, ce qui, en même temps, peut être conçu pour augmenter l'efficacité de collecte de porteurs minoritaires : une augmentation de la concentration du

Gallium dans l'absorbeur vers le contact arrière résulte dans la variation de la bande de conduction dans l'épaisseur du matériau, tandis que la bande de valence reste presque constante. Ce gradient de gap peut être obtenu par la variation continue de la concentration du gallium dans les procédés usuels de dépôt de la couche d'absorbeur tels que la coévaporation [33] qui a fait l'objet de nombreuses études dans le domaine du CIGS [34].

La figure (I.6) présente les types de gradients de gap principalement rencontrés dans les cellules CIGS :

(a) Le cas d'un gap constant: le transport des électrons n'est pas particulièrement influencé par la structure de bandes.

(b) Le gradient de gap normal: le gap au contact arrière est plus grand que le gap au contact avant. La différence de potentiel induite facilite ainsi le transport des électrons vers la zone de charge d'espace [35]. De plus, du fait de la présence d'un plus grand gap au contact arrière, les recombinaisons dans cette même zone sont réduites [36].

(c) Le gradient de gap inverse: le gap au contact avant est plus grand que le gap au contact arrière. Le fait de la présence d'un grand gap au niveau de la jonction, les recombinaisons dans la zone de charge d'espace sont réduites.

(d) Le double gradient de gap: il est en effet, composé d'une première zone allant du contact arrière jusqu'à une position communément appelée notch, d'un gap plus faible. Dans la seconde partie, le gradient est inversé et remonte vers l'avant. Ce dernier permet d'augmenter le gap effectif à l'hétérojonction et délimite les recombinaisons à l'interface avec la couche de type n [37]. Ainsi, dans la configuration en double gradient, la valeur du gap minimum (notch) sera déterminante pour l'absorption des photons et donc, le courant en court-circuit (J_{cc}). De même, les valeurs des gaps maximums (avant et arrière) influent sur la tension en circuit ouvert (V_{co}) [37]. Cependant, il a été également, démontré qu'en présence de trop forts gradients de Ga, le notch peut aussi agir comme barrière aux électrons et comme source de recombinaisons [38]. L'optimisation des gradients de concentration en Ga fait donc partie des points clés pour atteindre de hauts rendements de conversion avec des cellules à base de CIGS.

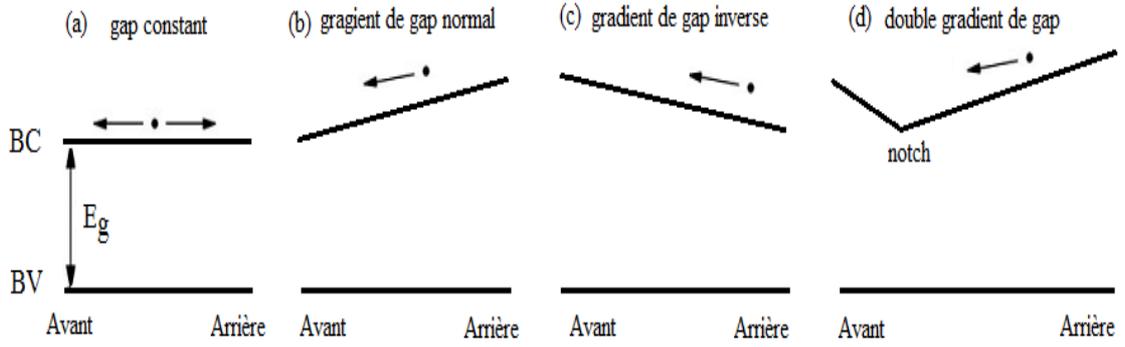


Figure (I.6): Principaux types de gradients de bande interdite rencontrés dans les couches de CIGS [39].

- *Mécanismes de recombinaisons*

Un mécanisme de recombinaison donné est caractérisé par un taux de recombinaisons R , représentant le nombre de recombinaisons par unité de temps et par unité de valeur de matériau semi-conducteur. Il existe trois types principaux de mécanismes : l'effet Auger, la recombinaison radiative et la recombinaison assistée par un piège dans la bande interdite appelée aussi recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH). Ce dernier mécanisme est le dominant dans les cellules basées sur des matériaux quaternaires et polycristallins comme le CIGS.

Les recombinaisons SRH se produisent lorsque des niveaux présents dans la bande interdite, qui peuvent provenir de défauts structuraux ou de la présence d'impuretés dans le CIGS, capturent des porteurs. Pour avoir une transition complète entre les bandes de valence et de conduction, le trajet se fera par ces niveaux pièges puisque la probabilité de transiter entre les bandes et les pièges est supérieure à la transition directe bande à bande. Les quatre processus possibles : émissions et captures des trous et électrons sont illustrés sur la figure (I.7).

La position la plus efficace pour les pièges pour permettre cette transition sera située en milieu de bande interdite. Le taux de recombinaison – génération résultant, R , peut être donné par [40] :

$$R_{SRH} = \frac{pn - n_i^2}{\tau_{SRH,n} \left(p + n_i \exp \frac{E_R - E_{Fl}}{kT} \right) + \tau_{SRH,p} \left(n + n_i \exp \frac{E_R - E_{Fl}}{kT} \right)} \quad (I.10)$$

Avec $\tau_{SRH,p}$ et $\tau_{SRH,n}$ sont respectivement les durées de vie des trous et d'électrons, n_i : concentration intrinsèque et E_R l'énergie associée aux centres piège.

Dans le cas du CIGS, les temps de vie $\tau_{n/p}$ des porteurs minoritaires mesurés par photoluminescence résolue en temps sont de l'ordre de la dizaine de nanosecondes [41].

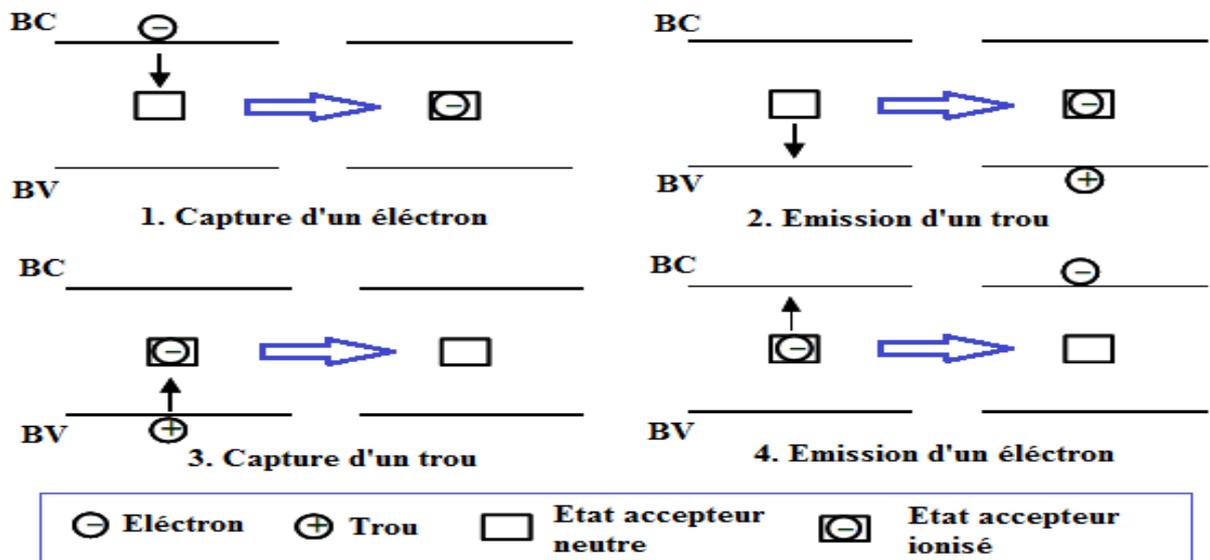


Figure (I.7): Les transitions permises dans le modèle de Shockley-Read-Hall

Les mécanismes de recombinaisons peuvent se produire à différentes positions dans l'épaisseur de la cellule. Les trois principales zones dans lesquelles elles se produisent sont: la zone quasi-neutre du CIGS, la zone de charge d'espace et l'interface CIGS/CdS [42]. Il a été montré que la majorité des recombinaisons se produisent dans le CIGS, c'est-à-dire dans les deux premières zones [43].

VI.3. Structure de la cellule CIGS

Dans sa structure la plus répandue, une cellule CIGS est formée d'un empilement de plusieurs matériaux en couches minces déposés successivement sur un substrat. La figure (I.8) présente la structure standard d'une cellule à base de $\text{Cu}(\text{In,Ga})(\text{Se})_2$.

Les principaux éléments dans la cellule sont:

VI.3.1. Substrat

Le substrat le plus couramment utilisé est le verre sodo-calcique, qui présente toutes les propriétés requises. Il contient notamment du sodium, qui diffuse vers le CIGS lors de l'étape de

recuit. Son effet bénéfique sur le fonctionnement de la cellule a été démontré par de nombreux auteurs [44,45].

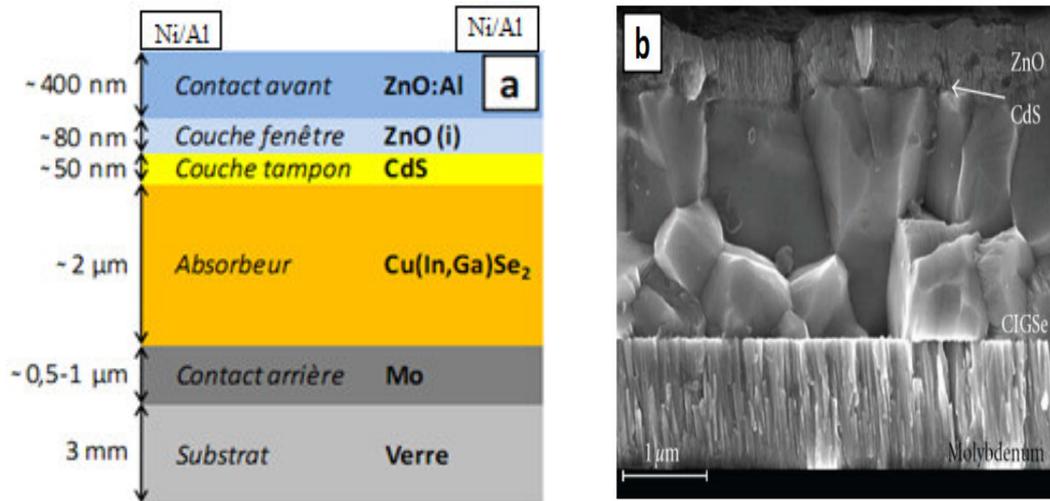


Figure (I.8) : Structure d'une cellule solaire à base de CIGS. (a) schéma de l'empilement des différentes couches, (b) image MEB de la tranche d'une cellule [40].

VI.3.2. Contact arrière

Le contact arrière, qui constitue le pôle positif du générateur photovoltaïque, est un métal déposé sur la partie inférieure de l'absorbeur dont le rôle est de collecter les porteurs à partir de l'absorbeur et de les livrer à la charge externe. Il doit donc, répondre à certains critères chimiques, mécaniques et économiques. De nombreux métaux ont été étudiés comme le Tungstène, le Molybdène, le Chrome, le Tantale, le Manganèse [46], l'Or, l'Aluminium, l'Argent et le cuivre [47]. Parmi ces métaux, le Molybdène qui est le plus couramment utilisé comme contact arrière des cellules solaires CIGS par les laboratoires de recherche et en industrie, en raison de sa stabilité relative aux températures élevées rencontrées lors du procédé de fabrication du CIGS (de l'ordre de 550 à 600 °C), et de sa faible résistance de contact avec le CIGS. Son épaisseur est d'environ 300 nm à 1000 nm. La méthode de dépôt utilisée est la pulvérisation cathodique. La valeur typique de la résistivité de Mo est de l'ordre $5 \times 10^{-5} \Omega\text{cm}$ ou moins. De plus, il ne réagit pas avec le CIGS ou y diffuse.

En effet, le Mo peut réagir avec le Se lors du dépôt de CIGS pour former une couche de quelques nanomètres de MoSe_2 . Par conséquent, la structure CIGS/Mo devient alors CIGS/ MoSe_2 /Mo. Le MoSe_2 est un semi-conducteur possédant un gap de 1,41 eV [48], il est

plus élevé que celui du CIGS est permis ainsi, de diminuer les recombinaisons à l'interface de ces deux couches [49]. De plus, il a pour effet de donner un comportement ohmique à l'hétérocontact CIGS/Mo [48, 50]. Mais le problème posé récemment pour le Mo est sa réflectivité relativement faible [51] qui devient un inconvénient lorsque des absorbeurs avec une épaisseur réduite ($< 2 \mu\text{m}$) sont utilisés. c.à.d. dans le cas où les photons incidents, avec des énergies plus grandes que la largeur de bande, ne peuvent pas être absorbés dans un seul passage dans l'absorbeur.

VI.3.3. Absorbeur

L'absorbeur est la partie de la cellule dans laquelle les photons vont être convertis en paires électrons-trous. Dans le cas présent, il s'agit d'un semi-conducteur de type P de la famille I-III-VI, dont les différentes variantes déjà étudiées conduisent à la formule générale suivante: $(\text{Cu}, \text{Ag}) (\text{In}, \text{Ga}, \text{Al}) (\text{Se}, \text{S}, \text{Te})_2$. La substitution du Cu par de l'argent, de l'indium par du gallium ou de l'aluminium, du sélénium par du soufre ou du tellure, permet de modifier les propriétés du matériau comme sa largeur de bande interdite. Le composé le plus développé en recherche et en industrie, et qui constitue le sujet de notre étude, est le $\text{Cu} (\text{In}, \text{Ga}) \text{Se}_2$ [52].

VI.3.4. Couche tampon

La couche tampon est un semi-conducteur ayant une conductivité de type n dont le gap doit être supérieur à celui de l'absorbeur. Deux rôles lui sont majoritairement attribués : un rôle électrique, et un rôle de couche protectrice. Du point de vue électrique, cette couche adapte la largeur de la bande interdite entre l'absorbeur et la couche fenêtre [53] et limite les recombinaisons des porteurs à l'interface de ces deux couches. Elle permet également de protéger la surface de l'absorbeur lors du dépôt par pulvérisation cathodique de la couche de ZnO, qui peut engendrer des défauts à la surface du CIGS [54].

Plusieurs semi-conducteurs de type n dont les bandes interdites sont entre 2,0 et 3,6 eV ont été appliqués comme tampon pour les cellules solaires CIGS. Cependant, le CdS déposé par bain chimique (CBD) reste le préféré car il donne toujours des hauts rendements [55, 56, 57]. Néanmoins, sa largeur de bande interdite, égale à 2,4 eV relativement faible engendre des pertes optiques, de sorte que des quantités importantes de lumière sont absorbées avant de pouvoir atteindre la couche CIGS, même pour les couches de CdS aussi minces que 50 nm.

Les photons absorbés dans le CdS ne contribuent pas au photocourant, à cause de la petite longueur de diffusion des porteurs minoritaires (trous) dans le CdS, ce qui conduit à un taux élevé de recombinaison. Pour cette raison, et en plus des contraintes liées à l'utilisation du Cadmium (Cd) qui est un élément toxique, de nombreuses études sont menées pour substituer le CdS par d'autres matériaux, parmi eux, on peut citer (OH, S), Zn (O, OH), ZnS [54,58] ou ZnSe [58-60].

VI.3.5. Couche fenêtre

La couche fenêtre doit être à la fois transparente, afin de laisser suffisamment de lumière à la région de jonction et la couche absorbante du dispositif, et conductrice pour permettre le transport du photo-courant généré au circuit extérieur 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 Ni sert de couche d'accroche et permet d'éviter l'oxydation de l'Al liée à la présence sous-jacente du TCO. Le TCO, généralement utilisé pour les cellules CIGS, est l'oxyde de Zinc (ZnO) déposé par pulvérisation cathodique, mais l'oxyde d'Indium dopé à l'étain (ITO) peut également être rencontré [61].

Une bicouche ZnO est souvent utilisée pour le contact frontal transparent. La première couche est une couche mince de ZnO intrinsèque (i-ZnO), qui est typiquement de (50 -100 nm) d'épaisseur et très résistive. Elle sert à limiter la formation de court-circuit dans les zones présentant un recouvrement imparfait du CIGS par la couche tampon [62]. La seconde couche est fréquemment du ZnO dopé à l'Aluminium (ZnO: Al), mais d'autres dopants comme le Bore (ZnO: B) [63] ou le Gallium (ZnO: Ga) [64] existent aussi. 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.

VI.3.6. Jonction p-n

La jonction p-n dans les cellules solaires CIGS est formée entre le semi-conducteur type p (CIGS) et le type n (CdS). Le diagramme d'énergie de bande de cette cellule est représenté sur la figure (I.9). La différence des affinités électroniques des deux matériaux constituant

la jonction se traduit par une discontinuité de bande interdite. La courbure de la bande de conduction ou ΔE_c (Conduction Band Offset) entre le CIGS et le CdS est par convention positive, ce qui signifie que la bande de conduction de CdS est supérieure à celle de CIGS.

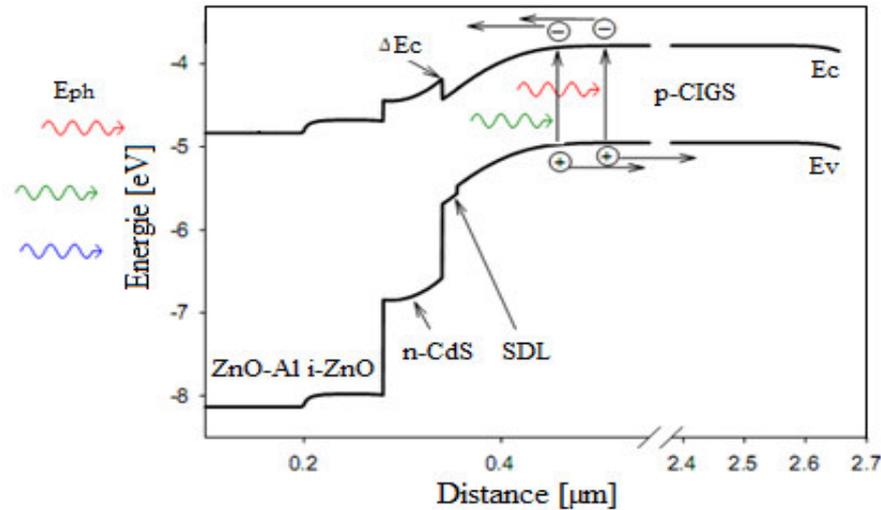


Figure (I.9): Structure de bande d'une cellule solaire Cu (In, Ga) Se₂.

La valeur optimale de la courbure de la bande de conduction est $\Delta E_c = 0,3$ eV est obtenue pour un gap de CIGS=1,15 eV. Une courbure de la bande de conduction supérieure à 0,5 eV crée une barrière forte pour les électrons photo- générés limitant ainsi, le transport du courant. En revanche, une courbure de la bande de conduction nulle ou négative conduit à une augmentation de la recombinaison à l'interface, ce qui limite la tension de la cellule.

La présence d'une couche de type inversé (type n) identifiée comme étant une couche de défauts de surface ou SDL (Surface Defect Layer) à la surface du matériau CIGS était rapportée par plusieurs auteurs [65]. Elle possède un gap plus large que le CIGS, ce qui permet de réduire la recombinaison à l'interface CdS/CIGS et contribue ainsi à l'amélioration des performances de la cellule [66,67]. Plus de détail sur cette couche dans le chapitre V.

VII. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté l'évolution des cellules solaires, leur principe de base de fonctionnement, qui est brièvement examiné dans la mesure où ceci est utile pour la compréhension de ce travail, et l'exploitation de la caractéristique courant tension de la cellule pour calculer ses différents paramètres physiques ainsi que les différents types des cellules

solaires en couches minces. Nous avons également, décrit les propriétés électriques et optiques du matériau utilisé dans ce travail à savoir : le CuInGaSe_2 (CIGS) ainsi que les propriétés des différentes couches constituant la cellule solaire.

Références chapitre I

- [1] Y. Park, V. Choong, Y. Gao, B. R. Hsieh and C. W. Tang, « Work function of indium thin oxide transparent conductor measured by photoelectron spectroscopy », *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 68, 1996, pp. 2699-2701.
- [2] G. Masson, M. Latour, M. Reking, I.T. Theologitis and M. Papoutsis. *Global Market Outlook for photovoltaics*. Technical report, EPIA, 2013.
- [3] D. Graham-Rowe, « Solar cells get flexible », *Nature Photonics*, Vol. 1, 2007, pp. 433.
- [4] C. Girault, E. James and A. Monfort, « Les cellules Grätzel: L'avenir de la filière photovoltaïque? », *C04- Energies Renouvelables*, ENSTA ParisTech, 2011.
- [5] J.B. Shi, Y. C. Chen, C. J. Chen and P. Wu, « Optical properties and synthesis of CuInSe₂ thin films by selenization of Cu/In layers », *Cryst. Res. Technol.*, Vol. 47, 2012, pp. 183.
- [6] S. C. Haudhuri, S. K. Das and A. K. Pal, « Optical transitions in CdTe thin films produced by hot-wall vacuum evaporation », *Thin Solid Films*, vol. 147, 1987, pp. 9.
- [7] U. Stephan, J. Kuske, W. Frammelsberger, P. Lechner, W. Psyk and H. Schade, « Large area deposition technique for PECVD of amorphous silicon [solar cells] », *Photovoltaic Specialists Conference, Conference Record of the Twenty-Sixth IEEE 29 Sept.-3 Oct., 1997*, pp. 647.
- [8] Y.B. He, W. Kriegseis, B.K. Meyer and A. Polity, « Heteroepitaxial growth of CuInS₂ thin films on sapphire by radio frequency reactive sputtering », *App. Phys. Lett.* Vol. 83, 2003, pp. 1743.
- [9] [http://www.futura-sciences.com/magazines/environnement/infos/dossiers/d/developpement - durable-cellules-photovoltaïques-coeur-panneaux-solaires-1688/page/10/](http://www.futura-sciences.com/magazines/environnement/infos/dossiers/d/developpement-durable-cellules-photovoltaïques-coeur-panneaux-solaires-1688/page/10/)
(consulté le 12/3/2015).
- [10] M. V. Fthenakis, « Life cycle impact analysis of cadmium in CdTe PV production », *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Vol. 8, 2004, pp. 303.
- [11] P. Jackson, D. Hariskos, R. Wuerz, W. Wischmann and M. Powalla, « Compositional investigation of potassium doped Cu(In,Ga)Se₂ solar cells with efficiencies up to 20.8% », *Phys. Status Solidi RRL*, Vol. 8, 2014, pp. 219.

- [12] H. Ullah, B. Marí and H. N. Cui, « Investigation on the Effect of Gallium on the Efficiency of CIGS Solar Cells through Dedicated Software », *Applied Mechanics and Materials*, Vol. 448, 2014, pp. 1497.
- [13] L. Ribeaucourt , G. Savidand, D. Lincot and E. Chassaing. « Electrochemical study of one-step electro deposition of copper-indium-gallium alloys in acidic conditions as precursor layers for Cu(In,Ga)Se₂ thin film solar cells », *Electrochimica Acta*. Vol. 56, 2011, pp. 6628.
- [14] A. Duchatelet, « Synthèse de couches minces de Cu(In,Ga)Se₂ pour cellules solaires par électro dépôt d'oxydes mixtes de cuivre-indium-gallium », Thèse de Doctorat, l'université de Lille1, 2012.
- [15] C. Honsberg and S. Bowden, « Photovoltaics: Devices, Systems and Applications » Sydney, University of New South Wales, Australia, 1998.
<http://www.pveducation.org/pvcdrom/instructions>,
(Consulté le 06/01/2015).
- [16] M. Oukachmih, « Les cellules photovoltaïques à base de matériaux organiques discotiques », Thèse de Doctorat, Université Toulouse-Paul Sabatier, 2003.
- [17] R. Alain, « Convertisseurs photovoltaïques», Comprese.doc, 2007.
http://www.cythelia.fr/images/file/Convertisseurs%20photovoltaïques_Alain%20Ricaud_Nov-07.pdf
- [18] J. H. Schön, E. Arushanov, Ch. Kloc and E. Bucher, « Electrical and photoluminescence properties of CuInSe₂ single crystals”, *Appl. Phys.*, Vol. 81, 1997, pp. 6205.
- [19] M. V. Yakushev, A. V. Mudryi, V. F. Gremenok, E. P. Zaretskaya, V. B. Zaleski, Y. Feofanov and R. W. Martin, « Influence of growth conditions on the structural quality of Cu(InGa)Se₂ and CuInSe thin films », *Thin Solid Films*, Vol. 451-452, 2004, pp. 133.
- [20] H. Sakata and H. Ogawa, « Optical and electrical properties of flash-evaporated amorphous CuInSe₂ films », *Solar Energy Materials and Solar Cells*, Vol. 63, 2000, pp. 259.
- [21] H. Neff, P. Lange, M. L. Fearheiley and J. Bachmann, « Optical and electrochemical properties of CuInSe₂ and CuInS₂-CuInSe₂ alloys », *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 47, 1985, pp. 1089.

- [22] J. E. Jaffe and A. Zunger, « Theory of the band-gap anomaly ABC2 chalcopyrite compounds », *Physical Review B*, Vol. 29, 1984, pp. 1882.
- [23] K. Orgassa, « Coherent Optical Analysis of the ZnO/CdS/Cu(In,Ga)Se₂ Thin Film Solar Cell », these de doctorat, Université de Stuttgart, 2004.
- [24] M. J. Hedstro and N. H. Ohlse, « ZnO/CdS/Cu(In,Ga)Se₂ thin-film solar cells with improved performance », *Proceedings of the 23rd IEEE Photovoltaic Specialists Conference*, 1993, pp. 364.
- [25] W. Shockley and H.J. Queisser, « Detailed Balance Limit of Efficiency of pn Junction Solar Cells », *J. Appl. Phys.*, Vol. 32, 1961, pp.510.
- [26] J. J. Loferski, « Theoretical considerations governing the choice of the optimum semiconductor for photovoltaic solar energy conversion », *J. Appl. Phys*, Vol. 27, 1956, pp.777.
- [27] H. Ullah, B. Marí and H. N. Cui, « Investigation on the Effect of Gallium on the Efficiency of CIGS Solar Cells through Dedicated Software», *Applied Mechanics and Materials*, Vol. 448, 2014, pp. 1497.
- [28] S. Saji, Viswanathan, Ik-Ho Choi and Chi-Woo Lee, « Progress in electrodeposited absorber layer for CuIn_{1-x}Ga_xSe₂ (CIGS) solar cells », *Solar Energy*, Vol. 85, 2011, pp. 2666.
- [29] D. Xia, J.Z. Li, M. Xu and X. Zhao, « Electrodeposited and selenized CIGS thin films for solar cells », *Journal of Non-Crystalline Solids*, Vol. 354, 2008, pp. 1447.
- [30] I. L. Repins, S. Glynn, J. Duenow, T.J. Coutts, W. K. Metzger. And M. A. Contreras, « Required material properties for high-efficiency CIGS modules », *Proc. SPIE 7409, Thin Film Solar Technology*, 2009.
- [31] S. Jung, S. Ahn, J. Ho Yun, J. Gwak, D. Kim and K. Yoon, « Effects of Ga contents on properties of CIGS thin films and solar cells fabricated by co-evaporation technique », *Current Applied Physics*, Vol.10, 2010, pp. 990.
- [32] J. Mandelkorn and J. H. Lamneck, « Simplified fabrication of back surface electric field silicon cells and novel characteristics » record of the 9th photovoltaic specialists conference, silver spring, USA, 1972, pp.66.

- [33] S. Seyrling, A. Chirila, D. Güttler, P. Blösch, F. Pianezzi, R. Verma, S. Bücheler, S. Nishiwaki, Y.E. Romanyuk and P. Rossbach. « Cu(In,Ga)Se₂ growth process modifications : Influences on microstructure, Na distribution, and device properties », *Solar Energy Materials and Solar Cells*, Vol. 95, 2011, pp. 1477.
- [34] A. Morales-Acevedo, « A simple model of graded band-gap CuInGaSe₂ », *solar cells, Energy Procedia* 2, 2010, pp.169.
- [35] M. Turcu, I. M. Kotschau and U. Rau, « Composition dependence of defect energies and band alignments in the Cu(In,Ga)(Se,S)₂ alloy system », *Journal of Applied Physics*, Vol. 91, 2002, pp.1391.
- [36] M. Kemell, M. Ritala and M. Leskelä, « Thin Film Deposition Methods for CuInSe₂ Solar Cells », *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences*, Vol. 30, 2005, pp. 1.
- [37] T. Nakada, Invited Paper: « CIGS-based thin film solar cells and modules: Unique material properties », *Electronic Materials Letters*, Vol. 8, 2012, pp. 179.
- [38] A. Chirila, S. Buecheler, F. Pianezzi, P. Bloesch, C. Gretener, A. R. Uhl, C. Fella, L. Kranz, J. Perrenoud, S. Seyrling, R. Verma, S. Nishiwaki, Y. E. Romanyuk, G. Bilger and A. N. Tiwari, « Highly efficient Cu(In,Ga)Se₂ solar cells grown on flexible polymer films », *Nature materials*, Vol.10, 2011, pp.857.
- [39] U. P. Singh and S. P. Petra, « Progress in polycrystalline Thin-Film Cu(In,Ga)Se₂ solar cells », *Hindawi Publishing Corporation International Journal of Photoenergy*, 2010, pp. 1.
- [40] W. Shockley, « *Electrons and Holes in Semiconductors* », D. Van Nostrand Co., Princeton, NJ, 1956, pp. 254.
- [41] I. L. Repins, W. K Metzger, C. L. Perkins, J. V. Li and M. A. Contreras, « Correlation Between Measured Minority-Carrier Lifetime and Cu(In,Ga)Se₂ Device Performance », *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 57, 2010, pp. 2957.
- [42] U. Rau and H.W. Schock, « Electronic properties of Cu(In,Ga)Se₂ heterojunction solar cells-recent achievements, current understanding, and future challenges », *Applied Physics A, Materials Science & Processing*, Vol. 69, 1999, pp. 131.

- [43] U. Rau, A. Jasenek, H.W. Schock, F. Engelhardt and T. Meyer. « Electronic loss mechanisms in chalcopyrite based heterojunction solar cells », *Thin Solid Films*, Vol. 361-362, 2000, pp. 298.
- [44] F. Kessler, D. Herrmann and M. Powalla, « Approaches to flexible CIGS thin-film solar cells », *Thin Solid Films*, Vol. 480-481, 2005, pp. 491.
- [45] K. Granath, M. Bodegård and L. Stolt, « The effect of NaF on Cu(In,Ga)Se₂ thin film solar cells », *Solar Energy Materials and Solar Cells*, Vol. 60, 2000, pp. 279.
- [46] K. Orgassa, H. W. Schock and J. H. Werner, « Alternative back contact materials for thin film Cu(In,Ga)Se₂ solar cells », *Thin Solid Films*, Vol. 431–432, 2003, pp. 387.
- [47] R. J. Matson, O. Jamjoum, A. D. Buonaquisti, P. E. Russell, L. L. Kazmerski, P. Sheldon and R. K. Ahrenkiel, « Metal contacts to CuInSe₂ », *Solar cells*, Vol. 11, 1984, pp. 301.
- [48] N. Kohara, S. Nishiwaki, Y. Hashimoto, T. Negami and T. Wada, « Electrical properties of the Cu(In,Ga)Se₂/ MoSe₂/Mo structure », *Solar Energy Materials and Solar Cells*, Vol. 67, 2001, pp. 209.
- [49] M. Kemell, M. Ritala and M. Leskelä, « Thin Film Deposition Methods for CuInSe₂ Solar Cells », *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences*, Vol. 30, 2005, pp. 1.
- [50] M. Powalla and B. Dimmler, « Scaling up issues of CIGS solar cells », *Thin Solid Films*, Vol. 361–362, 2000, pp. 540.
- [51] A. Luque, « *Practical Handbook of Photovoltaics (Second Edition)* », 2012.
- [52] A. Duchatelet, « *Synthèse de couches minces de Cu(In,Ga)Se₂ pour cellules solaires par électro dépôt d'oxydes mixtes de cuivre-indium-gallium* », Thèse de Doctorat, université de Lille1, 2012.
- [53] M. Buffiere, « *Synthèse et caractérisation de couches minces de Zn(O,S) pour application au sein des cellules solaires à base de Cu(In,Ga)Se₂* », Thèse de doctorat, université de Nantes, 2011.

- [54] N. Naghavi, D. Abou-Ras, N. Allsop, N. Barreau, S. Bücheler, A. Ennaoui, C.H. Fischer, C. Guillen, D. Hariskos, J. Herrero, R. Klenk, K. Kushiya, D. Lincot, R. Menner and T. Nakada, « Buffer layers and transparent conducting oxides for chalcopyrite $\text{Cu}(\text{In,Ga})(\text{S,Se})_2$ based thin film photovoltaics : present status and current developments », *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, Vol.18, 2010, pp. 411.
- [55] P. Jackson, D. Hariskos, E. Lotter, S. Paetel, R. Wuerz, R. Menner, W. Wischmann and M. Powalla, « New world record efficiency for $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ thin-film solar cells beyond 20% », *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, Vol. 19, 2011, pp 894.
- [56] I. Repins, M. A. Contreras, B. Egaas, C. DeHart, J. Scharf, C. L. Perkins, B. To and R. Noufi, « 19.9%-efficient $\text{ZnO}/\text{CdS}/\text{CuInGaSe}_2$ Solar Cell with 81.2% Fill Factor », *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, Vol. 16, 2008, pp. 235.
- [57] E. Wallin, U. Malm, T. Jarmar, O. Lundberg, M. Edoff and L. Stolt, « World-record $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ -based thin-film sub-module with 17.4% efficiency », *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, Vol. 20, 2012, pp. 851.
- [58] A. Romeo, M. Terheggen, D. Abou-Ras, D. L. Batzner, F. J. Haug, M. Kalin, D. Rudmann and A. N. Tiwari, « Development of thin-film $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ and CdTe solar cells », *Progress in Photovoltaics: research and Applications*, Vol. 12, 2004, pp. 93.
- [59] M. Kemell, M. Ritala and M. Leskelä, « Thin Film Deposition Methods for CuInSe_2 Solar Cells », *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences*, Vol. 30, 2005, pp. 1.
- [60] C. H. Fischer, M. Bär, T. Glatzel, I. Lauermann, and M. C. Lux-Steiner, « Interface engineering in chalcopyrite thin film solar devices », *Solar energy materials and solar cells*, Vol. 90, 2006, pp. 1471.
- [61] T. Nakada, Y. Hirabayashi, T. Tokado, D. Ohmori and T. Mise, « Novel device structure for $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ thin film solar cells using transparent conducting oxide back and front contacts», *Solar Energy*, Vol. 77, 2004, pp. 739.
- [62] U. Rau, P. O. Grabitz and J. H. Werner, « Resistive limitations to spatially inhomogeneous electronic losses in solar cells », *Applied Physics Letters*, Vol. 85, 2004, pp. 6010.

- [63] Y. Hagiwara, T. Nakada and A. Kunioka, « Improved Jsc in CIGS thin film solar cells using a transparent conducting ZnO:B window layer », *Solar Energy Materials and Solar Cells*, Vol. 67, 2001, pp. 267.
- [64] B. Sang, K. Kushiya, D. Okumura and O. Yamase, « Performance improvement of CIGS-based modules by depositing high-quality Ga-doped ZnO windows with magnetron sputtering », *Solar Energy Materials and Solar Cells*, Vol. 67, 2001, pp. 237.
- [65] D. Schmid, M. Ruckh, F. Grunwald and H. W. Schock, « Chalcopyrite/defect chalcopyrite heterojunctions on the basis of CuInSe₂ », *Journal of Applied Physics*, Vol. 73, 1993, pp. 2902.
- [66] Y. Yan, K. M. Jones, J. Abushama, M. Young, S. Asher, M.M. Al-Jassim and R. Noufi, « Microstructure of surface layers in Cu(In,Ga)Se₂ thin films », *Applied Physics Letters*, Vol. 81, 2002, pp.1008.
- [67] S. M. Lee, S. Ikeda, Y. Otsuka, W. Septina, T. Harada and M. Matsumura, « Homogeneous Electrochemical deposition of in on a Cu-covered Mo Substrate for fabrication of efficient solar cells with a CuInS₂ photo absorber », *Electrochimica Acta*, Vol. 79, 2012, pp.189.

Chapitre II :

Présentation du modèle utilisé

et des outils de simulation

I. Introduction

La modélisation est largement utilisée dans le domaine photovoltaïque afin de déterminer les paramètres les plus importants pour le fonctionnement des cellules solaires. Elle permet en fait, de mieux comprendre le fonctionnement de ces dispositifs et donne des idées aux fabricants pour varier et adapter leurs méthodes de production afin d'améliorer les performances du produit. Le schéma de la figure (II.1) représente le rôle de la modélisation pour améliorer les performances des cellules solaires. Une fois que la cellule solaire est produite, elle doit être caractérisée et analysée afin de déterminer par la suite les causes de pertes. Cette analyse peut être soutenue par les techniques de modélisation, qui permettent à la fois, de donner des explications physiques aux causes de pertes, de tester la viabilité des explications physiques proposées, de prévoir l'effet de la variation des paramètres physiques sur les performances de la cellule et enfin, suggérer les chemins à suivre pour améliorer les performances du dispositif.

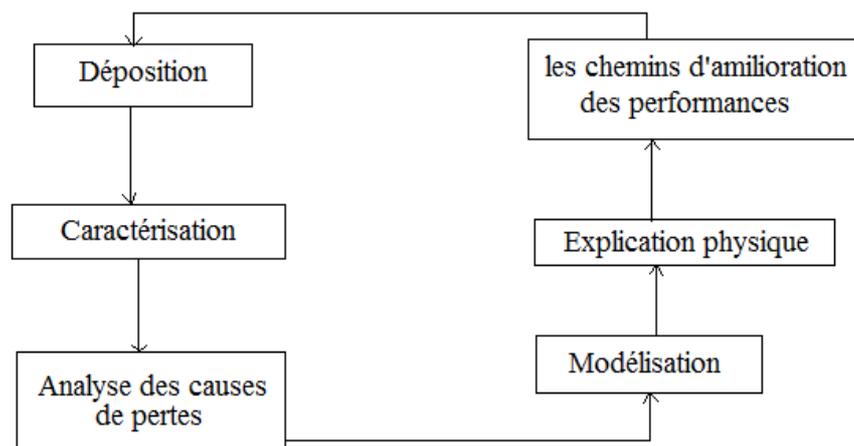


Figure (II.1) : Schéma représentant le rôle de la modélisation pour améliorer les performances des cellules solaires.

II. Méthodes de modélisation

En réalité, la plupart des études faites sur les cellules solaires sont expérimentales vu que les chercheurs s'intéressent beaucoup plus aux travaux expérimentaux au détriment de la recherche théorique qui reste toujours insuffisante. Cependant, le calcul est une méthode simple, économique et elle nous épargne l'effort et le temps pour optimiser les paramètres des cellules solaires en couches minces. En fait, la modélisation est largement utilisée dans l'analyse de cellules solaires. Les différentes façons de modéliser ces dispositifs peuvent être divisées en deux types : les modèles analytiques et les modèles numériques. Pour le modèle analytique, un

circuit électrique équivalent, qui est basé sur des composants électriques discrets dont le comportement est bien connu, est modélisé. Cette façon de modéliser les composants électroniques est commune en physique de dispositif semi-conducteur. Le deuxième type de modélisation est le modèle numérique, il implique souvent la résolution des équations aux dérivées partielles en utilisant soit la méthode aux différences finies ou la méthode des éléments finis. La modélisation numérique est un outil précieux pour comprendre le fonctionnement de cellules solaires. Elle permet de contrôler les propriétés des couches constituant la cellule en tant que paramètres d'entrée du modèle et par conséquent, l'évaluation des tendances des changements de performances de la cellule en s'appuyant sur J-V, QE.

II.1. Modélisation analytique

Pour développer un circuit équivalent précis pour une cellule photovoltaïque, il est nécessaire de comprendre la configuration physique des éléments de la cellule aussi bien que les caractéristiques électriques de chaque élément. Selon cette philosophie, plusieurs modèles électriques ont été proposés pour représenter la cellule photovoltaïque.

II.1.1. Modèle à une diode

Le modèle analytique le plus courant et le plus utilisé par de nombreux auteurs pour obtenir des valeurs de certains paramètres de la caractéristique courant - tension d'une cellule solaire par des méthodes d'approximations, au moins dans le cas de cellules CIGS, est le modèle d'une diode décrit dans la figure (II.2). Cependant, il existe d'autres alternatives, comme le modèle à deux diodes qui est souvent utilisé pour modéliser les cellules solaires en silicium cristallin.

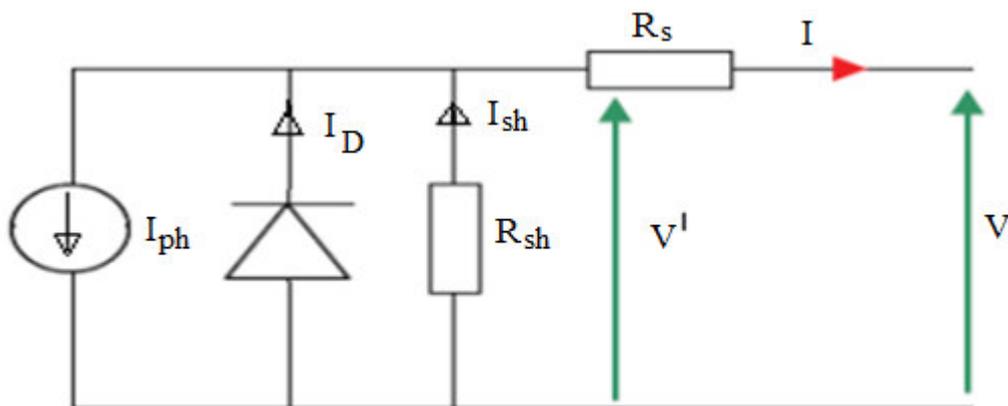


Figure (II.2) : Le circuit équivalent d'une cellule solaire d'après le modèle d'une diode

Le modèle à une seule diode, utilisé dans ce travail, est constitué d'un générateur de courant en parallèle avec une diode et une résistance de shunt, R_{sh} , qui sont tous connectés en série avec une résistance en série, R_s . La résistance série est due à la contribution des résistances de base et du front de la jonction et des contacts face avant et arrière. La résistance parallèle rend compte des effets ; tels que le courant de fuite par les bords de la cellule. Une équation pour le modèle à une seule diode est dérivée en utilisant le circuit équivalent et l'équation de la diode [1] :

$$I_D = I_0 \left(e^{\frac{qV}{AkT}} - 1 \right) \quad (II.1)$$

Suivant la loi de Kirchhoff

$$I = I_D + I_{sh} - I_{ph} \quad (II.2)$$

La loi de tension de Kirchhoff et la loi d'ohm donnent

$$V' = V - IR_s \quad (II.3)$$

Les équations (II.1) et (II.3) donnent

$$I_D = I_0 \left(e^{qV'/AkT} - 1 \right) = I_0 \left(e^{\frac{q(V-IR_s)}{AkT}} - 1 \right) \quad (II.4)$$

La loi d'ohm et l'équation (II.3)

$$I_{sh} = \frac{V'}{R_{sh}} = \frac{V - IR_s}{R_{sh}} \quad (II.5)$$

La substitution de (II.4) et (II.5) dans (II.2) donne l'équation caractéristique d'une cellule solaire d'un modèle à une diode [1-2] :

$$I = I_0 \left(e^{q(V-IR_s)/AkT} - 1 \right) + \frac{V - IR_s}{R_{sh}} - I_{ph} \quad (II.6)$$

Où : I_0 est le courant de saturation de la diode, A le facteur de qualité de la diode, I_{ph} le courant généré par l'éclairement, R_s la résistance série et R_{sh} la résistance de shunt.

La puissance fournie par la cellule solaire est toujours inférieure au produit $V_{co} \times I_{cc}$

$$P < V_{co} I_{cc} = \frac{nKT}{q} I_{cc} \ln \left(\frac{I_{ph}}{I_0} + 1 \right) \quad (II.7)$$

La puissance fournie par la cellule est donnée par le produit ($V \times I$).

$$P = V \times I = V \times \left[I_{cc} - I_0 \left[\exp\left(\frac{V + I \times R_s}{V_T}\right) - 1 \right] - \frac{V + I \times R_s}{R_{sh}} \right] \quad (\text{II. 8})$$

Cette puissance fournie est maximum au point défini par :

$$\frac{dP}{dV} = 0$$

La tension de sortie V_m correspondant au maximum de puissance est alors donnée par la relation:

$$\exp\left(\frac{V_m}{V_T}\right) \left[1 + \frac{V_m}{V_T} \right] = \exp\left(\frac{V_{co}}{V_T}\right) \quad (\text{II. 9})$$

Alors que le courant maximal correspondant est donné par la relation:

$$I_m = (I_{cc} + I_0) \left[\frac{(V_m/V_T)}{1 + (V_m/V_T)} \right] \quad (\text{II. 10})$$

Les valeurs de I_0 , R_s , R_{sh} dépendent de la taille physique de la cellule solaire. Pour cette raison, l'équation caractéristique est souvent écrite en termes de densité de courant, ou courant produit par unité de surface de cellule unitaire:

$$J = J_0 \left(\exp\left(\frac{q(V - JR_s)}{AkT}\right) - 1 \right) + \frac{(V - JR_s)}{R_{sh}} - J_{ph} \quad (\text{II. 11})$$

La tension de circuit-ouvert V_{co} et le rendement de conversion de la cellule solaire, η , sont définis par les équations (I.4) et (I.6).

II.1.2. Photo-courant I_{ph}

Le photo-courant est la somme de trois composantes, le courant de diffusion des photoélectrons de la région de type p , le courant de photo-génération dans la zone de charge d'espace et le courant de diffusion des photo-trous de la région de type n . On obtient le photo-courant total en ajoutant ces trois composantes calculées en un même point x_j (voir figure (II.3)) [3, 4].

$$J_{ph} = J_n(x = x_j) + J_g(x = x_j) + J_p(x = x_j) \quad (\text{II.12})$$

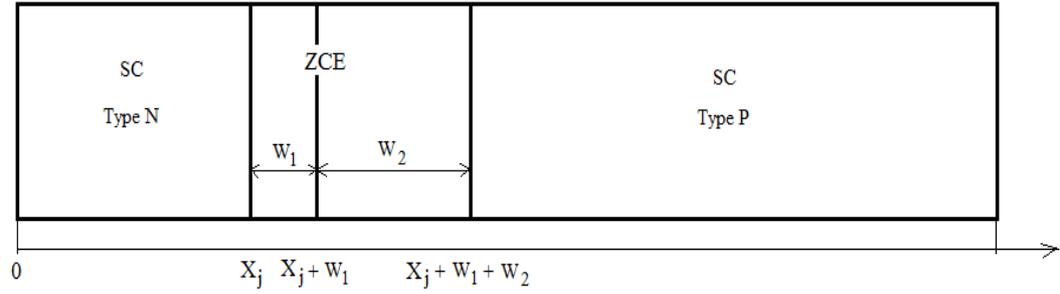


Figure (II.3) : Schéma d'une jonction P-N éclairée.

Si on néglige la recombinaison dans la ZCE, le nombre d'électron qui arrivent à $x_j + w_1 + w_2$ égale au nombre d'électron partant du x_j . Si on néglige les recombinaisons dans la zone de charge d'espace, tous les électrons qui arrivent en $x_j + w_1 + w_2$, depuis la région de type p, se retrouvent en x_j , soit :

$$J_n(x = x_j) = J_n(x = x_j + w_1 + w_2)$$

Avec :

w_1 : L'épaisseur de la ZCE dans le semi-conducteur 1 du type N (CdS).

w_2 : L'épaisseur de la ZCE dans le semi-conducteur 2 du type P (CIGS).

- *Le courant des trous dans la région n (CdS)*

Le taux de génération de paires électron-trous à une dimension x de la surface du semiconducteur1 est donné par:

$$G(\lambda, x) = \alpha_1(\lambda)F(\lambda)(1 - R(\lambda)) \exp(-\alpha_1 x) \quad (\text{II. 13})$$

$F(\lambda)$: est le nombre de photons incidents par cm^{-2} par s^{-1} par unité de longueur d'onde.

$R(\lambda)$: est la fraction de photons réfléchis de la surface.

α_1 : est le coefficient d'absorption dans le semi-conducteur 1 (CdS).

Le photo-courant qui va produire ces porteurs peut être déterminé sous la condition de faible injection, les équations de continuité pour les porteurs minoritaires sont :

$$\frac{1}{e} \frac{dJ_p}{dx} - G_p + \frac{p_n - p_{n0}}{\tau_{p1}} = 0 \quad (\text{II. 14})$$

Pour les trous dans la région (n) (CdS), et pour les électrons dans la région (p) (CIGS) :

$$\frac{1}{e} \frac{dJ_n}{dx} - G_n + \frac{n_p - n_{p0}}{\tau_{n2}} = 0 \quad (\text{II. 15})$$

τ_{p1} : est la durée de vie des trous dans la région (n).

τ_{n2} : est la durée de vie des électrons dans la région (p).

n_{p0} : est la densité des électrons dans la région (p) à l'équilibre.

p_{n0} : est la densité des trous dans la région (n) à l'équilibre.

Les courants de trous et d'électrons sont :

$$J_p = eD_{p1} \frac{dp_n}{dx} + e\mu_{p1} p_n E \quad (\text{II. 16})$$

$$J_n = eD_{n2} \frac{dn_p}{dx} + e\mu_{n2} n_p E \quad (\text{II. 17})$$

D_{p1} : est la constante de diffusion des trous dans le semi-conducteur (n).

D_{n2} : est la constante de diffusion des électrons dans le semi-conducteur (p).

μ_{p1} : est la mobilité des trous dans le semi-conducteur (n).

μ_{n2} : est la mobilité des électrons dans le semi-conducteur (p).

D'où :

$$D_{p1} = \mu_{p1} \left(\frac{KT}{e} \right) \quad (\text{II. 18})$$

$$D_{n2} = \mu_{n2} \left(\frac{KT}{e} \right) \quad (\text{II. 19})$$

KT : énergie thermique à la température ambiante.

Les équations (II.14) et (II.16) sont combinées pour tirer une expression pour la région (n) (l'émetteur) :

$$D_{p1} \frac{d^2 p_n}{dx^2} + G_p - \frac{p_n - p_{n0}}{\tau_{p1}} = 0 \quad (\text{II. 20})$$

L'équation (II.20) est une équation différentielle du deuxième degré avec second membre; elle a pour solution, une solution homogène (S_h) et une solution particulière (S_r):

$$S_h = ACosh \frac{x}{L_{p1}} + BSinh \frac{x}{L_{p1}}$$

Où L_{p1} est la longueur de diffusion des trous, $L_{p1} = \sqrt{D_{p1}\tau_{p1}}$

$$S_r = k \exp(-\alpha_1 x)$$

Où A, B, k sont des constantes.

Donc la solution générale est:

$$S_G = S_h + S_r$$

$$S_G = n_p - n_{p0} = ACosh \left(\frac{x}{L_{p1}} \right) + BSinh \left(\frac{x}{L_{p1}} \right) + k \exp(-\alpha_1 x) \quad (\text{II. 21})$$

On obtiendra la constante k par l'application de la solution particulière dans l'équation différentielle (II.20) par la dérivation de la solution particulière (S_r).

On a donc :

$$n_p - n_{p0} = ACosh \left(\frac{x}{L_{p1}} \right) + BSinh \left(\frac{x}{L_{p1}} \right) - \frac{\alpha_1 F(1-R)\tau_{p1}}{(\alpha_1^2 L_{p1}^2 - 1)} \exp(-\alpha_1 x) \quad (\text{II. 22})$$

Les conditions aux limites sont comme suit:

- A la surface, une recombinaison se produit avec une vitesse S_p :

$$S_p(p_n - p_{n0}) = D_{p1} \frac{d(p_n - p_{n0})}{dx} \quad \text{à } x = 0$$

- A la limite de la jonction, la densité des porteurs en excès est réduite à zéro par le champ électronique dans la zone de déplétion:

$$p_n - p_{n0} = 0 \quad \text{à } x = x_j$$

A partir de ces conditions aux limites, nous obtenons les expressions de A et B, puis nous les remplaçons dans l'équation (II.22):

$$p_n - p_{n0} = \left[\frac{\alpha F(1-R)\tau_p}{\alpha^2 L_p^2 - 1} \right] \left[\frac{\left(\frac{S_p L_p}{D_p} + \alpha L_p \right) \sinh\left(\frac{x_j - x}{L_p}\right) + \exp(\alpha x_j) \left(\frac{S_p L_p}{D_p} \sinh\left(\frac{x}{L_p}\right) + \cosh\left(\frac{x}{L_p}\right) \right)}{\frac{S_p L_p}{D_p} \sinh\left(\frac{x_j}{L_p}\right) + \cosh\left(\frac{x_j}{L_p}\right)} - \exp(-\alpha x) \right] \quad (\text{II. 23})$$

et la densité du photo-courant des trous à la zone de déplétion est:

$$J_p = -eD_p \left(\frac{dp_n}{dx} \right)_{x_j} = \left[\frac{eF(1-R)\alpha L_p}{\alpha^2 L_p^2 - 1} \right] \times \left[\frac{\left(\frac{S_p L_p}{D_p} + \alpha L_p \right) - \exp(-\alpha x_j) \left(\frac{S_p L_p}{D_p} \cosh\left(\frac{x_j}{L_p}\right) + \sinh\left(\frac{x_j}{L_p}\right) \right)}{\frac{S_p L_p}{D_p} \sinh\left(\frac{x_j}{L_p}\right) + \cosh\left(\frac{x_j}{L_p}\right)} - \alpha L_p \exp(-\alpha x_j) \right] \quad (\text{II. 24})$$

- *Courant des électrons dans la région p*

Le taux de génération de paires électrons-trous à une dimension x de la surface du semi-conducteur 2 est donné par:

$$G(\lambda, x) = \alpha_2(\lambda)F(1-R) \exp\left(\alpha_1(x_j + w_1)\right) \exp(-\alpha_2 w_2) \exp(-\alpha_2 x) \quad (\text{II. 25})$$

Pour trouver le photo-courant des électrons générés dans la base, les équations (II.15), (II.17) et (II.19) sont nécessaires avec les conditions aux limites suivantes:

- De même que la région de l'émetteur, au bord de la zone de déplétion, la densité des porteurs minoritaires en excès est nulle:

$$n_p - n_{p0} = 0 \quad x = x_j + w_1 + w_2$$

- A la surface arrière de la cellule une recombinaison en surface prend place S_n . Notons que la vitesse de recombinaison au contact arrière est très élevée:

$$S_n(n_p - n_{p0}) = D_{n2} \left(\frac{d(n_p - n_{p0})}{dx} \right) \quad x = h$$

h : l'épaisseur totale de la cellule.

En exploitant ces conditions aux limites, et avec l'utilisation d'une expression des électrons similaire à celle des trous, on déduit alors la distribution des électrons dans la région de base :

$$\begin{aligned} n_p - n_{p0} = & \left[\frac{\alpha F(1-R)\tau_n}{\alpha^2 L_n^2 - 1} \right] \exp[-\alpha(x_j + w_1)] \\ & \times \left[\cosh\left(\frac{x - x_j - w_1}{L_n}\right) - \exp[-\alpha(x_j + w_1)] \right. \\ & - \frac{\left(\frac{S_n L_n}{D_n}\right) \left[\cosh\left(\frac{H'}{L_n}\right) - \exp(-\alpha H') \right] + \sinh\left(\frac{H'}{L_n}\right) + \alpha L_n \exp(-\alpha H')}{\frac{S_n L_n}{D_n} \sinh\left(\frac{H'}{L_n}\right) + \cosh\left(\frac{H'}{L_n}\right)} \\ & \left. \times \sinh\left(\frac{x - x_j - w_1}{L_n}\right) \right] \end{aligned} \quad (\text{II. 26})$$

La densité du photo-courant issue de la base due aux électrons collectés à la limite de la jonction est:

$$\begin{aligned} J_n = & \left[\frac{e\alpha F(1-R)L_n}{\alpha^2 L_n^2 - 1} \right] \exp[-\alpha(x_j + w_1)] \\ & \times \left[\alpha L_n \right. \\ & - \frac{\left(\frac{S_n L_n}{D_n}\right) \left[\cosh\left(\frac{H'}{L_n}\right) - \exp(-\alpha H') \right] + \sinh\left(\frac{H'}{L_n}\right) + \alpha L_n \exp(-\alpha H')}{\frac{S_n L_n}{D_n} \sinh\left(\frac{H'}{L_n}\right) + \cosh\left(\frac{H'}{L_n}\right)} \left. \right] \end{aligned} \quad (\text{II. 27})$$

Où $H' = h - (x_j + w_1 + w_2)$.

H' : Epaisseur de la base.

L_n : longueur de diffusion des électrons,

$$L_{n2} = \sqrt{D_{n2}\tau_{n2}}$$

w_1 et w_2 sont données par :

$$w_1 = \sqrt{\frac{2 \mathcal{E}_1}{e N_{d1}} \frac{\mathcal{E}_2 N_{a2} V_d}{(\mathcal{E}_1 N_{d1} + \mathcal{E}_2 N_{a2})}}$$

$$w_2 = \sqrt{\frac{2 \mathcal{E}_2}{e N_{a2}} \frac{\mathcal{E}_1 N_{d1} V_d}{(\mathcal{E}_1 N_{d1} + \mathcal{E}_2 N_{a2})}}$$

ε_1 : La permittivité relative du semi-conducteur 1.

ε_2 : La permittivité relative du semi-conducteur 2.

- *Le courant de génération*

Une génération de photo-courant prend origine, à l'intérieur de la région de déplétion. Le champ électrique dans cette région est assez élevé pour que les porteurs photo-générés soient accélérés à l'extérieur des zones de charge d'espace avant qu'ils se recombinent.

L'équation de continuité s'écrit:

$$\frac{1}{e} \frac{dJ_n}{dx} + G = 0 \quad (\text{II. 28})$$

Le courant de génération d'électrons en $x = x_j$ est donné par:

$$J_{gn}(x = x_j) = -e \int_{x_j}^{x_j+w_1+w_2} G dx \quad (\text{II. 29})$$

$$J_{gn}(x = x_j) = -eF(\lambda)(1 - R) \left[\alpha_1 \int_{x_j}^{x_j+w_1} \exp(-\alpha_1 x) dx + \alpha_2 \int_{x_j+w_1}^{x_j+w_1+w_2} \exp(-\alpha_2 x) dx \right] \quad (\text{II. 30})$$

Le courant dans la ZCE est donc:

$$J_{gn}(x = x_j) = -eF(\lambda)(1 - R) \exp(-\alpha_1 x_j) \times [(1 - \exp(-\alpha_1 w_1)) + \exp(-\alpha_1 w_1)(1 - \exp(-\alpha_2 w_2))] \quad (\text{II. 31})$$

Dans ce travail, un programme en Matlab a été élaboré pour le calcul des paramètres électriques de la cellule CdS/CIGS. La méthode que nous avons adoptée pour la résolution des

équations non linéaires dans notre étude est celle de Newton-Raphson et ce pour sa précision ainsi que sa vitesse de convergence élevée. Cette méthode est considérée la meilleure pour la résolution des équations non linéaires.

II.2. Modélisation numérique des cellules solaires

La modélisation numérique des dispositifs à semi-conducteur est basée sur la résolution des équations aux dérivées partielles avec certaines conditions aux limites. Par rapport à la modélisation analytique qui utilise des éléments de circuit macroscopiques, les simulations numériques permettent de calculer les propriétés physiques fondamentales, telles que le potentiel électrique et les concentrations d'électrons et de trous. Cela peut fournir plus d'informations sur les paramètres du matériau qui influent sur les caractéristiques du dispositif. Dans le modèle numérique, comme dans toutes les simulations des dispositifs à semi-conducteurs, l'équation de Poisson (II.32) est résolue avec des conditions aux limites appropriées, ainsi que les équations de continuité pour les électrons et les trous (II.33) et (II.34), respectivement :

$$\nabla(\varepsilon_r \varepsilon_0 \nabla \Psi) = q(p - n + N_D - N_A) \quad (\text{II.32})$$

$$\nabla J_n = -q(G - R_n) \quad (\text{II.33})$$

$$\nabla J_p = -q(G - R_p) \quad (\text{II.34})$$

Où Ψ est le potentiel électrique tandis que p et n sont les densités de porteurs. N_A et N_D désignent le dopage, accepteurs et donneurs. J_n et J_p sont les densités de courant des électrons et des trous, respectivement, tandis que G et R sont le taux de génération et le taux de recombinaison, respectivement.

Ces trois équations (II.32 à II.34) sont des équations différentielles des semi-conducteurs les plus fondamentaux. En outre, il ya les équations de densité de courant qui relient les densités de courant, les densités de porteurs et le potentiel électrique :

$$J_n = q\mu_e n \nabla \Psi + qD_e \nabla n \quad (\text{II.35})$$

$$J_p = q\mu_p p \nabla \Psi + qD_{ep} \nabla p \quad (\text{II.36})$$

III. Logiciels utilisés

En principe, n'importe quel programme numérique capable de résoudre les équations de base des semi-conducteurs peut être employé pour modéliser les cellules solaires à couches minces. La simulation de ces dispositifs 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 en titre d'exemple : PC-1D, AFORS-HET, ASA, ASPIN, AMPS-1D [5] et SCAPS-1D [6]. Tous ces programmes sont à une seule dimension, qui est généralement suffisante pour les cellules solaires de géométrie classiques, en particulier à de faibles intensités solaires et matériaux semi-conducteurs qui ne sont pas bien caractérisés. Dans ce présent travail, les deux derniers logiciels ont été utilisés. Ils permettent en fait, de prendre en compte de façon précise les principaux phénomènes physiques régissant le fonctionnement de nos dispositifs : transport du courant, recombinaison des porteurs de charge, comportement optique, etc.

III.1. AMPS-1D

Le logiciel de simulation numérique des cellules solaire Analysis of Microelectronic and Photonic Structures ou AMPS-1D a une réputation internationale dans la recherche photovoltaïque. Il a été développé par le groupe des Fonash professeur de l'université de Pennsylvanie [5]. Il a été conçu pour être un outil informatique très général et polyvalent de simulation pour l'analyse de microélectroniques et structures photoniques. Il s'agit d'une seule dimension qui est applicable à tout dispositif à deux bornes. Il peut être pour la diode, le capteur photodiode et l'analyse des dispositifs photovoltaïques. Son principe de base est de résoudre l'équation de poisson et les équations de continuité soumis à des conditions aux limites associées des électrons libres et des trous à l'aide de Newton-Raphson.

L'utilisation de ce logiciel est très pratique car il permet de simuler n'importe quelle structure photovoltaïque, il permet d'aller jusqu'à 30 couches. En plus, le AMPS permet l'analyse un large éventail de structures de dispositifs sous illumination/sous tension ou les deux, selon les matériaux disponibles en fichiers data, en agissant sur les paramètres variables (largeur, surface, dopage, etc.). Une description détaillée des techniques de solution peut être trouvée dans le manuel d'AMPS [7].

III.1.1. Utilisation de l'AMPS

Le logiciel AMPS-1D se divise en quatre parties. Les trois premières sont pour la programmation où il faut introduire les paramètres du dispositif, des régions et de l'excitation. La quatrième partie concerne les résultats de la simulation où le logiciel calcule, les bandes interdites, les caractéristiques J-V, les courant de recombinaison, la génération...

Pour faire démarrer la simulation par AMPS-1D, trois types de paramètres sont nécessaires:

III.1.1.1. Propriétés générales du dispositif et du matériau

- *Les propriétés du matériau* : pour une simulation réussie, les paramètres d'entrée comprennent : l'épaisseur du matériau, la constante diélectrique, la bande interdite, l'affinité électronique, la mobilité et la densité des états effective, la concentration des porteurs, le coefficient d'absorption, les états de défauts, la densité de défauts, la distribution de défauts, la section de capture efficace et enfin, les états de queues de bande.
- *Propriétés générales du dispositif* : elles englobent :

- *Contacts avant et arrière*

Les contacts avant et arrière sont définis par leur fonction de travail et par la réflectivité de l'interface du contact/semi-conducteurs. Le Φ_{b0} et le Φ_{bL} qui représentent la différence entre la bande de conduction (E_c) et le niveau de Fermi (E_F), respectivement à la surface avant ($x = 0$) et arrière ($x = L$) doivent être choisis de façon à obtenir un contact ohmique à la surface avant et une négligeable barrière de Schottky à la surface arrière.

- *Recombinaisons aux surfaces*

Les interfaces entre les couches polycristallines de la cellule sont riches en défauts, générés par le désaccord de maille et les impuretés, ce qui cause la recombinaison des porteurs. Le paramètre utilisé pour décrire cette recombinaison est donnée en fonction de la vitesse de recombinaison de surface [4]. Tout calcul numérique pour ce travail a utilisé une vitesse de recombinaison de surface de 10^7 cm/s, ce qui correspond approximativement à la vitesse thermique des électrons.

➤ Réflectivité à la surface avant et arrière

La réflectivité de la surface avant limite le rendement quantique de la cellule et donc la densité du courant de court-circuit. Ce paramètre est réglé à 10%. La réflexion arrière a une influence négligeable sur la performance donc, on a considéré que 95% des photons atteignant la surface arrière seront réfléchis.

III.1.1.2. Conditions environnementales

L'illumination est définie discrètement sur la figure (II.4). Le nombre de photons incidents par (cm²s) est en fonction de longueurs d'onde entre 0,38 μm et 1,24 μm, avec une taille de pas de 0,02 et 0.03 μm.

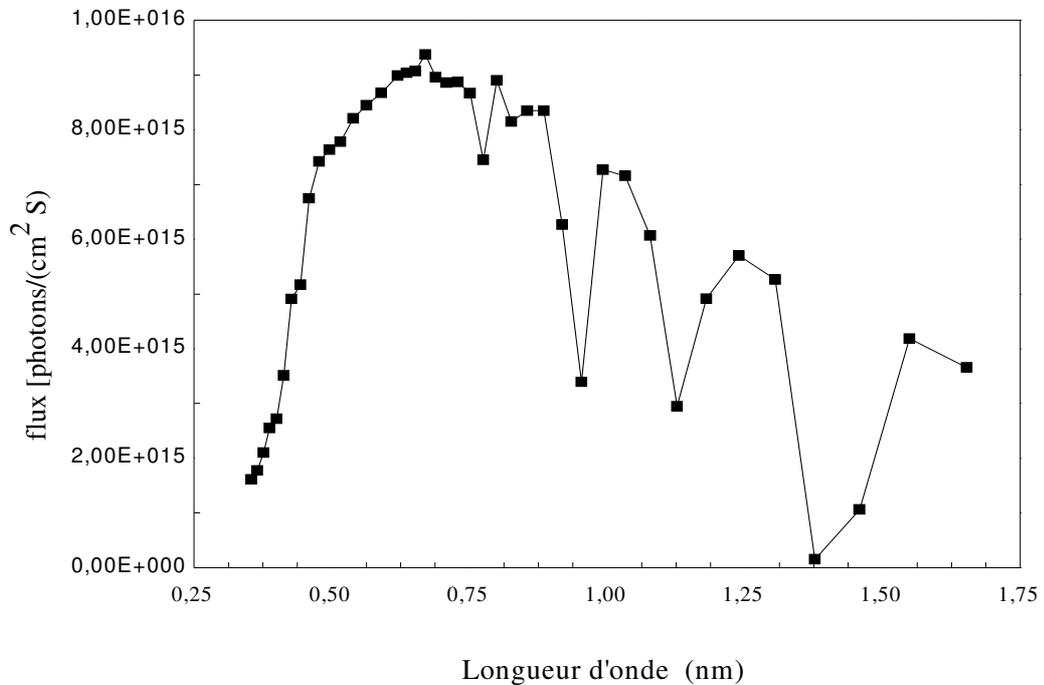


Figure (II.4) : Le spectre solaire AM1.5 utilisé dans ce travail par l'AMPS-1D.

III.1.1.3. Paramètres de modélisation

Les paramètres de modélisation sont : le type de mode de fonctionnement, le maillage (grid spacing) pour les calculs numériques, la tension de polarisation pour laquelle JV et QE devraient être générés.

Le logiciel de l'AMPS peut fonctionner en deux modes distincts: le mode de la densité d'état ou DOS (Density Of States) ou le mode de la durée de vie (Lifetime). Une description des deux modes peut être trouvée dans le manuel d'AMPS [7].

- Le mode de la durée de vie: ce mode accepte les entrées sous forme de durée de vie des porteurs, qui sont supposés constants, indépendants de la lumière et de la tension de polarisation, et le processus de recombinaison sera modélisé par un modèle linéaire donné par la relation :

$$\text{Type p : } R_n = \frac{\Delta n}{\tau_n}$$

$$\text{Type n : } R_p = \frac{\Delta p}{\tau_p}$$

Δn (Δp) : Le changement de la population des électrons (trous) dans la bande de conduction (valence) par rapport à la concentration à l'équilibre thermique n_0 (p_0).

τ_n et τ_p : les durées de vie des électrons et des trous, respectivement.

- Le mode DOS (Density Of Stats): ce mode permet de définir multiples états de défauts, en utilisant les densités, les distributions d'énergie, et les sections de capture. En se basant sur ces informations la recombinaison et les défauts sont calculés en utilisant le formalisme de Shockley-Read-Hall. Si le matériau utilisé a une densité de défauts importants tels que les matériaux amorphes ou polycristalins, l'utilisation du modèle DOS devient indispensable. Dans ce travail le mode DOS a été utilisé.

Le maillage a été choisi pour être plus dense dans les couches minces où des changements plus rapides se produisent dans la structure de la bande afin d'obtenir une bonne résolution.

III.1.2. Avantages et inconvénients de l' AMPS

Les majeurs inconvénients de ce logiciel sont : l'absence du traitement d'interfaces et l'obligation de l'utilisation manuelle où toutes les informations doivent être entrées à la main (spectre solaire, coefficient d'absorption...). Cependant, il est très stable en général bien que les dispositifs complexes peuvent introduire des instabilités. Il possède également, une bonne interface utilisateur, notamment un programme de traçage flexible.

III.2. SCAPS-1D

Le SCAPS-1D acronyme de « Solar Cell Capacitance Simulator one Dimension » est un logiciel de simulation des cellules solaires unidimensionnelles développé à l'Université de Gent en Belgique par Marc Burgelman et al. pour simuler les caractéristiques électriques des dispositifs photoniques tels que les cellules solaires à couches minces. Le SCAPS a été développé à l'origine pour des structures des cellules de CuInSe_2 et de CdTe . Cependant, Plusieurs version ont amélioré ses capacités de façon à devenir applicable pour des cellules solaires cristallines (Si et GaAs) et des cellules amorphes (a-Si et de Si micro-morphe). Avec le SCAPS, il est possible de simuler des structures constituées d'un nombre définis de couches (jusqu'à 7 couches intermédiaires ainsi que les contacts avant et arrière), avec des profils de dopage différents, et avec des distributions énergétiques des niveaux donneurs ou accepteurs donnés, dans le volume et aux interfaces pour un spectre de lumière arbitraire. La majorité des paramètres peuvent être introduits avec variations graduées (en dépendance de la composition et de la profondeur de la cellule). Par exemple, χ , ϵ , N_C , N_V , V_{thn} , V_{thp} , μ_n , μ_p , N_A , N_D , tous les pièges (défauts) N_t plus l'effet tunnel (Tunneling) inter-bandes (dans la bande de conduction ou dans la bande de valence).

III.2.1. Utilisation du SCAPS

Le logiciel SCAPS possède trois grandes fenêtres :

- Fenêtre d'exécution (action panel) : elle contient deux blocs :

Le premier bloc permet de spécifier les conditions de l'expérience et les points de fonctionnement tels que, la température, la tension, la fréquence, l'illumination, les résistances série et shunt. En revanche, le deuxième bloc permet de sélectionner les grandeurs voulus afin de les simuler à savoir: la caractéristique IV, la capacitance – voltage, la capacitance-fréquence et la réponse spectrale.

- Fenêtre de conception de dispositif et la définition du problème (Définition panel) :

Cette fenêtre permet de définir le dispositif photovoltaïque où l'ajout d'une couche affiche une fenêtre qui contient un grand nombre de paramètres électriques comme l'énergie de gap, la permittivité électrique, l'affinité, le dopage, et le type de dopage. En plus, les défauts de différents types peuvent être définis, à la fois, dans la masse de couches et aux interfaces. En considérant leurs états de charge et la recombinaison à leurs niveaux à savoir : le type de

charge, la distribution énergétique, la propriété optique et les transitions métastables entre les niveaux.

Toutefois, il faut noter que les Propriétés optiques telles que le coefficient d'absorption et la réflexion face avant et arrière, en fonction de la longueur d'onde, peuvent être importés des fichiers data du logiciel. On note également, que le code du SCAPS contient des fichiers data d'extension.def qui contiennent une conception et une définition du dispositif photovoltaïque standard comme le CdTe et le CIGS. En outre, la conception est modifiable grâce à des champs spécifiques.

- Fenêtre des résultats :

Cette fenêtre affiche les résultats de la simulation sous forme de graphe avec la possibilité de les sauvegarder ou exporter leurs valeurs. Le SCAPS est capable de calculer les bandes d'énergie, les concentrations et les courants à un point de fonctionnement donné, les caractéristiques (J-V), les caractéristiques du courant alternatif (C et G en fonction de la tension V et /ou f), le rendement quantique (également avec polarisation lumière ou tension), et les bandes d'énergies en régime alternatif.

III.2.2. Avantages et inconvénients du SCAPS

Les avantages du SCAPS sont multiples à savoir : la grande vitesse d'exécution, les fichiers d'entrée sont accessibles à l'utilisateur en format texte tel que les données spectrales et les paramètres décrivant le dispositif, la possibilité d'introduire des interfaces et prise en compte du phénomène de recombinaison en celle-ci, l'introduction de résistances en série, et l'obtention des caractéristiques capacité-tension et capacité-fréquence. Cependant, ses inconvénients concernent l'absence de la réflexion aux interfaces de différentes couches constituant la cellule qui n'est pas gérée par le SCAPS et son programme de traçage inflexible. D'autant plus, qu'il peut être instable lorsque le dispositif est loin d'être idéal et comprend des barrières secondaires.

IV. Description des paramètres de modélisation

IV.1. structure étudiée

La figure (II.5) illustre la structure de la cellule solaire de référence à hétérojonction (n-ZnO/n-CdS/p-CIGS) utilisée pour la simulation où le calcul des performances de la cellule s'effectue sous illumination standard AM1.5 (100mW/cm²).

Ni/Al		Ni/Al
ZnO:Al		
i-ZnO		
CdS		
SDL		
CIGS		
Molybdène		
Substrat (SLG)		

Figure (II.5): Structure d'une cellule solaire à base de $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$ utilisée dans ce travail.

IV.2. Paramètres de modélisation

La difficulté rencontrée avec la simulation des cellules solaires CIGS est le manque de valeurs de mesure pour certaines grandeurs physiques sur lesquelles la simulation se base. Alors que plusieurs d'entre eux, comme largeur de bande, constante diélectrique, propriétés optiques, affinité électronique, sont disponibles à partir de la littérature pour la plupart des matériaux utilisés dans les dispositifs de CIGS. Pour cette raison, nous avons utilisé une situation de référence, avec l'ensemble le plus probable de paramètres pour une cellule de base, puis les paramètres sont variés dans des gammes bien définies afin d'étudier les effets spécifiques. Les paramètres de base des quatre couches de la cellule utilisés dans la simulation sont présentés dans le tableau (II.1), ils ont été compilés à partir de différentes sources [8-10].

IV.2.1. Contact arrière

Dans l'AMPS-1D, le contact arrière est modélisé par la fonction de travail de sortie ϕ_w du Mo qui est prise égale à 4.7 eV [11] avec une vitesse de recombinaison à ce contact égale à 10^7 cm/s exception dans le chapitre V où cette valeur varie dans une gamme de 10^2 - 10^7 cm/s afin d'étudier son influence sur les paramètres électriques de la cellule solaire [12].

IV.2.2. Absorbeur CIGS

La bande interdite du CIGS dans ce travail varie entre 1.01 -1.67 eV est calculée en fonction du taux de gallium, x ($x=\text{Ga}/\text{In}$) selon l'équation (I.9). La bande interdite est uniforme dans ce travail exception dans le chapitre IV où elle varie graduellement dans l'absorbeur.

Les propriétés de la couche				
	CIGS	SDL	CdS	i: ZnO
W (μm)	2	0.015	0.05	0.2
E _g (eV)	1.15	1.3	2.4	3.3
χ (eV)	4.5	4.5	4.45	4.55
$\varepsilon/\varepsilon_0$	13.6	13.6	10	9
N _c (cm ⁻³)	2*10 ¹⁸	2*10 ¹⁸	1.3*10 ¹⁸	3.1*10 ¹⁸
N _v (cm ⁻³)	1.5*10 ¹⁹	1.5*10 ¹⁹	9.1*10 ¹⁸	1.8*10 ¹⁹
v _n (cm/s)	3.9*10 ⁷	3.9*10 ⁷	3.1*10 ⁷	2.4*10 ⁷
v _p (cm/s)	1.4*10 ⁷	1.4*10 ⁷	1.6*10 ⁷	1.3*10 ⁷
μ_n (cm ² /Vs)	100	10	72	100
μ_p (cm ² /Vs)	12.5	1.25	20	31
doping (cm ⁻³)	1*10 ¹⁶ (a)	1*10 ¹³ (a)	5*10 ¹⁷ (d)	1*10 ¹⁷ (d)
Les propriétés des défauts au volume				
N (cm ⁻³)	1.1*10 ¹⁴ (d)	1.1*10 ¹⁴ (d)	5*10 ¹⁶ (a)	1*10 ¹⁶ (a)
σ_n (cm ²)	10 ⁻¹³	10 ⁻¹³	10 ⁻¹⁵	10 ⁻¹⁵
σ_p (cm ²)	10 ⁻¹⁵	10 ⁻¹⁵	5*10 ⁻¹³	5*10 ⁻¹³
Les propriétés d'interface				
	SDL/ CIGS		SDL/ CdS	
N (cm ⁻³)	10 ¹¹		3*10 ¹³	
σ_n (cm ²)	10 ⁻¹⁵		10 ⁻¹⁵	
σ_p (cm ²)	10 ⁻¹⁵		10 ⁻¹⁵	

Tableau (II.1): Les paramètres de base des quatre couches de la cellule utilisés dans la simulation.

IV.2.3. Régions d'interfaces

- *Couche de défauts de surface (SDL)*

Les propriétés électriques de la couche de défauts à la surface du CIGS (couche SDL) ne sont pas bien connues. Mais des mesures montrent l'existence d'une large bande interdite à la surface des films CuInSe₂ [13,14]. A cause du gap élevé de cette couche (SDL), il est attendu que la recombinaison à l'interface CdS/CIGS sera réduite.

Dans ce travail toutes les propriétés électriques de la couche SDL ont été choisies similairement à celles de l'absorbeur CIGS au volume à l'exception de la bande interdite (supérieure à celle du CIGS de 0,2 eV), le dopage et la mobilité des porteurs. Concernant cette dernière, de faibles mobilités ont été choisies car la couche SDL est plus désordonnée que le matériau CIGS au volume.

- *Courbure des bandes*

La courbure de la bande de valence et la bande de conduction font parti des paramètres les plus importants qui caractérisent les hétérojonctions, en particulier, la courbure de la bande entre la couche tampon et l'absorbeur qui joue un rôle important pour déterminer le rendement de la cellule solaire [15,16]. En effet, des études ont montré que la courbure de la bande de valence du Cu(In,Ga)Se_2 , ΔE_v , est souvent indépendante du taux de Ga. Ainsi, l'augmentation de la bande interdite du Cu(In,Ga)Se_2 due à l'ajout du Ga au CuInSe_2 mène à un changement de ΔE_c d'une valeur positive à une valeur négative.

Plusieurs auteurs ont essayé de déterminer la courbure de la bande de conduction ou CBO (Conduction Band Offset) ΔE_c entre le CIS et le CdS [17-20]. Les résultats montrent une variation de la CBO entre une petite valeur négative et 0.7 eV. La valeur négative de la CBO peut augmenter la recombinaison d'interface et spécialement peut détruire les performances de la cellule si la densité des défauts présente à l'interface est élevée. On note que la CBO diminue plus en augmentant le taux du gallium dans le CIGS, due à l'augmentation de la bande de conduction.

La courbure de la bande de conduction à l'interface est donnée par la différence entre les deux affinités électroniques des deux matériaux CIGS et CdS.

$$\Delta E_c = \chi_{\text{CIGS}} - \chi_{\text{CdS}} \quad (\text{II.37})$$

On note que l'affinité électronique du CIGS varie en fonction du gallium, x, selon l'équation :

$$\chi = 4.35 - 0.421x - 0.244x^2 \quad (\text{II.38})$$

Et la courbure de la bande de valence est donnée par la relation suivante :

$$\Delta E_V = \chi_{CdS} - \chi_{CIGS} + (E_g^{CdS} - E_g^{CIGS}) \quad (II.39)$$

- *Propriétés des défauts d'interface.*

Les dispositifs avec des couches tampons de CdS ne sont pas dominés par la recombinaison d'interface. Dans le chapitre V, des défauts d'interface donateurs ont été considérés pour obtenir un modèle plus réaliste. Le pincement du niveau de Fermi à l'interface CIGS/CdS a été modélisé par une haute densité, $3 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, des défauts donneurs proches de la bande de conduction CIGS ($E_t=0,2 \text{ eV}$). Ici, de petites sections efficaces de capture de 10^{-18} cm^2 ont été choisies pour séparer les défauts de pincement des défauts de recombinaison.

Toutes les couches constituant la cellule sont polycristallines. Elles contiennent donc, un grand nombre de défauts qui dépendent du processus de fabrication (de dépôt). Pour une position simple de ces défauts on a choisi un niveau de défaut pour toutes les couches au milieu de la bande interdite [21]. De même, des défauts d'interface sont placés à mi-gap de la largeur de bande interdite la plus faible de la matière voisine. La cellule est simulée sous un éclairage solaire AM1.5 avec une densité de puissance de 100 mW/cm^2 et à une température de 300K.

Sur la figure (II.6), la courbe courant-tension résultante de la simulation, en utilisant les paramètres du tableau (II.1), est comparée à celle mesurée par [22]. Les résultats montrent que la courbe J-V mesurée est très bien reproduite par les paramètres utilisés ce qui valide nos paramètres utilisés comme cas de base pour la simulation dans ce travail. Les paramètres J-V de la simulation et de l'expérimentale [22] sont affichés dans le tableau (II.2)

	V_{co} (mV)	J_{cc} (mA/cm ²)	FF (%)	Rendement (%)
Simulation	684	-35,239	0,789	19,04
Expérimental [21]	688	-35,7	0,781	19,20

Tableau (II.2) : Les paramètres J-V simulés et mesurés.

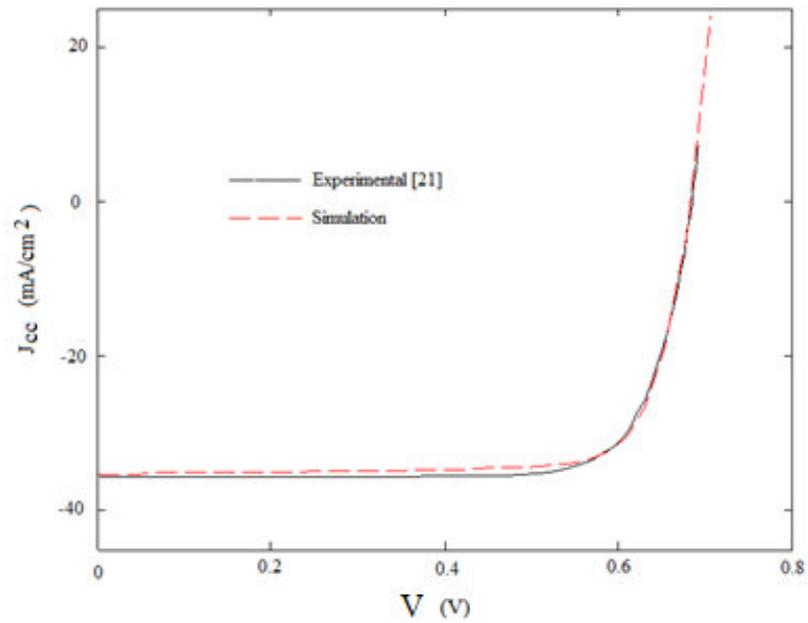


Figure (II-6) : Comparaison de la courbe de simulation et la courbe expérimentale [23]

V. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté le modèle de la cellule solaire à une diode choisi pour optimiser les paramètres optiques et géométriques de la cellule solaire. Nous avons exposé le calcul des courants dans les différentes régions ainsi que le courant total. Puis nous avons décrit brièvement les logiciels de calcul utilisés dans ce travail : l'AMPS-1D et le SCAPS-1D. Enfin une description des paramètres de simulation utilisés est présentée.

Références chapitre II

- [1] S. R. Wenhan, M. A. Green, M. E. Watt, R.P. Corkish and A.B. Sproul, « Applied Photovoltaics, (third edition), Earthscan, 2011.
- [2] M. D. Archer, « The past and present », In: Clean electricity from photovoltaics, ed. by M. D. Archer and R. Hill, London: Imperial College Press, 2001, pp. 1–32.
- [3] G. Adolf; K. Joachim and V. Bernhard « *Crystalline Silicon Solar Cells* », the Principles of Photovoltaics, book, 2014.
- [4] S. M. Sze and K. N. Kwok, « *Physics of semi-conductors devices* », Third Edition. Wiley – Inter science publication, Jhon Wiley & Sons, Inc, 2007.
- [5] S. J. Fonash, « Analysis of Microelectronic and Photonic Structures (AMPS) software was developed at Pennsylvania State University under the direction of S.J. Fonash with funding from the Electric Power Research Institute ». <http://www.cneu.psu.edu/amps/>.
- [6] M. Burgelman, A. De Vos, and A. Niemegeers, « Device simulation of polycrystalline heterojunction solar cells ». In Proceedings of the 12th European Photovoltaic Solar Energy Conference, Amsterdam, 1994, pp. 1557.
- [7] « AMPS -1D Manual for Windows '95/NT, The Electronic Materials and Processing Research Laboratory at the Pennsylvania State University, University Park, PA 16802.
- [8] G. Hanna, A. Jasenek, U. Rau and H.W. Schock, « influence of the Ga-content on the bulk defect densities of Cu(In,Ga)Se₂ », Thin Solid Film, Vol. 387, 2001, pp. 71.
- [9] S.B. Zhang, S. H. Wei, and A. Zunger, « A phenomenological model for systematization and prediction of doping limits in II-VI and I-II-VI₂ compounds», J.Appl.Phys.,Vol.83,1998,pp. 3192.
- [10] B. Ohnesorge, R. Weigand, G. Bacher, and A. Forchel, « Minority-carrier lifetime and efficiency of Cu(In,Ga)Se₂ solar cells», Appl. Phys. Lett., Vol. 73, 1998, pp. 1224.
- [11] S. Fonash, « Solar cell device physics », Second Edition, Academic press in an imprint of Elsevier.
- [12] B. Vermang, V. Fjallstrom, J. pettersson, P. Salomé and M. Edoff, « Development of rear surface passivated Cu(In,Ga)Se₂ thin film solar cells with nano-sized local rear point contacts », Solar Energy Materials and Solar cells, Vol. 117, 2013, pp. 505.

- [13] M. Morkel, L. Weinhardt, B. Lohmuller, C. Heske, E. Umbach, W. Riedl, S. Zweigart, and F. Karg, « Flat conduction-band alignment at the CdS/CuInSe₂ thin-film solar-cell heterojunction ». *Applied Physics Letters*, Vol. 79, 2001, pp. 4482.
- [14] D. Schmid, M. Ruckh, F. Grunwald, and H.W. Schock, « Chalcopyrite/defect chalcopyrite heterojunctions on the basis of CuInSe₂ », *Journal of Applied Physics*, Vol. 73, 1993, pp. 2902.
- [15] S. Siebentritt, « Wide gap chalcopyrites: material properties and solar cells », *Thin Solid Films*, Vol. 403-404, 2002, pp. 1-8.
- [16] R. Klenk, « Characterisation and modelling of chalcopyrite solar cells », *Thin Solid Films*, Vol.387, 2001, pp. 135.
- [17] D. Schmid, M. Ruckh, and H. W. Schock, « A comprehensive characterization of the interfaces in Mo/CIS/CdS/ZnO solar cell structures ». *Sol. Energy Materials and Solar Cells*, Vol. 41-42, 1996, pp. 281.
- [18] A. Klein and T. Schulmeyer, « Interfaces of Cu-Chalcopyrites ». In Susanne Siebentritt and Uwe Rau (editors), « Wide-Gap Chalcopyrites », vol. 86 of Springer Series in Materials Science, Springer Berlin Heidelberg, 2006, pp. 213.
- [19] T. Loher, W. Jaegermann, and C. Pettenkofer, « Formation and electronic properties of the CdS/CuInSe₂ (011) heterointerface studied by synchrotron-induced photoemission », *J. App. Phys.*, Vol. 77, 1995, pp. 731.
- [20] D. Schmid, M. Ruckh, and H.W. Schock, « Photoemission studies on Cu(In,Ga)Se₂ thin films and related binary selenides », *Applied Surface Science*, Vol. 103, 1996, pp. 409.
- [21] W. N. Shafarman and L. Stolt, « Cu(In,Ga)Se₂ Solar Cells ». In Antonio Luque and Steven Hegedus (editors), « Handbook of Photovoltaic Science and Engineering », John Wiley & Sons Inc., 2003, chap. 13, pp. 567.
- [22] A. O. Pudov, « Impact of secondary barriers on CuIn_{1-x}Ga_xSe₂ solar-cell operation », Thèse de Doctorat, Colorado State University, 2005.
- [23] N. Touafek, R. Mahamdi, « Excess defects at the CdS/CIGS interface solar cells », *Chalcogenide Letters*, Vol. 11, 2014, pp. 589.

Chapitre III :

*Influence des paramètres physiques et géométriques
sur les performances de la cellule*

I. Introduction

L'objectif de ce chapitre en premier lieu, est l'étude de l'influence des paramètres de la cellule solaire à base de CuInSe_2 en utilisant le modèle analytique décrit dans le chapitre II. Nous chercherons les paramètres physiques et géométriques optimaux qui assureront les meilleures caractéristiques de sortie de la cellule à savoir ; le rendement de conversion en puissance et le rendement quantique. En second lieu, et afin d'adapter le gap CuInSe_2 à une valeur optimale de l'absorption du spectre solaire, le gallium est ajouté au matériau. Pour cela, nous varierons le taux du gallium dans l'alliage pour observer son influence sur les grandeurs photovoltaïques de la cellule solaire, ainsi que sur le taux de génération-recombinaison par le biais du logiciel SCAPS-1D.

II. Influence de l'épaisseur du CdS

La fonction principale de la couche CdS dans la structure est de former l'hétérojonction avec la couche du CuInSe_2 . L'épaisseur de cette couche doit être mince et sa largeur de bande interdite doit être aussi élevée que possible pour un taux de photon d'énergie ($h\nu > E_{g\text{CdS}}$) absorbé minimal et une résistance série faible. La figure (III.1) illustre la variation du rendement de la cellule solaire CuInSe_2 en fonction de l'épaisseur de la couche CdS, en fixant l'épaisseur de la couche absorbante ou la base (E_b) à $2 \mu\text{m}$.

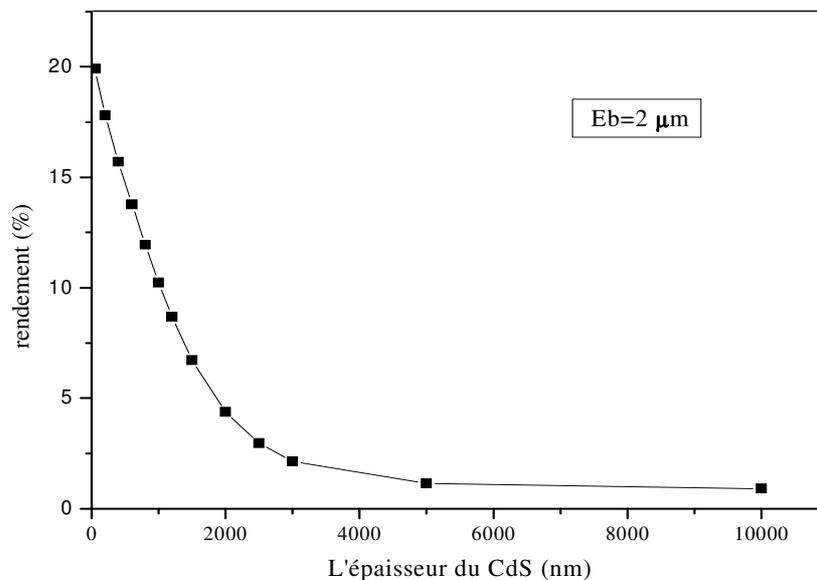


Figure (III.1) : La variation du rendement de la cellule solaire CuInSe_2 en fonction de l'épaisseur de la couche tampon (CdS) [2].

Le rendement est réduit avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche du CdS de façon linéaire dans l'intervalle de 100 à 1000 nm. Le taux de réduction de rendement est d'environ 0,01% / nm. Le rendement est considérablement réduit lorsque l'épaisseur du CdS est supérieure à 50 nm. Ceci est en bon accord avec les résultats expérimentaux qui indiquent que la réduction de l'épaisseur du CdS inférieure à 20 nm améliore le rendement de la cellule solaire [1].

La couche CdS ou émetteur d'épaisseur (E_e) est responsable d'une partie des pertes par absorption dans la cellule. Nous remarquons sur la figure (III.2), que pour les longueurs d'onde en-dessous de 500 nm (équivalent au gap du CdS=2,42 eV), le rendement quantique diminue sensiblement avec l'augmentation de l'épaisseur. Ce phénomène peut être attribué à l'absorption de la lumière dans cette couche au détriment de la couche absorbante CuInSe_2 . Par contre, l'épaisseur du CdS n'a aucune influence sur le rendement quantique de la cellule au voisinage de gap du CuInSe_2 . Pour les longueurs d'onde $\lambda=500-1200$ nm (correspondent aux gaps du CdS et CuInSe_2), nous observons clairement l'effet réducteur de l'épaisseur de l'émetteur (CdS) sur le photocourant total où le rendement quantique diminue en augmentant l'épaisseur du CdS.

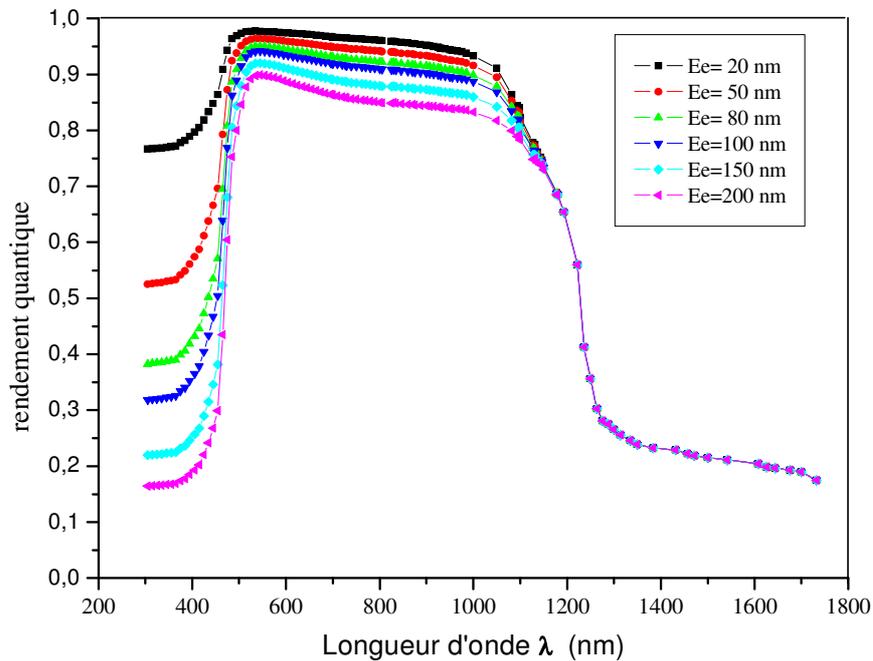


Figure (III.2) : La variation du rendement quantique de la cellule solaire CuInSe_2 en fonction de la longueur d'onde incidente pour différentes épaisseurs de la couche de CdS [2].

L'augmentation de l'épaisseur de la couche tampon (CdS) réduit le nombre de photons qui peuvent être absorbés par la couche CuInSe_2 . Pour une épaisseur fixe de l'émetteur, nous notons

l'augmentation progressive du rendement quantique en fonction de l'énergie de photon jusqu'à une valeur limite pour ensuite décroître au-delà des énergies supérieures au seuil du CdS (2.42 eV).

III. Influence de la couche absorbante CuInSe₂

Pour une production de masse, la réduction de l'épaisseur de la couche absorbante réduit la quantité de consommation de matières (en particulier les éléments rares tel que l'In) et par conséquent, le coût de production de la cellule solaire. La recherche actuelle se concentre sur la réduction de l'épaisseur de la couche absorbante sans modifier défavorablement les performances des cellules solaires. Ceci explique l'importance d'étudier l'influence de l'épaisseur de l'absorbant sur le rendement de la cellule. Sur la figure (III.3), nous avons rapporté les résultats de calcul du rendement en fonction de l'épaisseur de la couche absorbante avec une épaisseur fixe de la couche tampon égale 50 nm. Pour une épaisseur variant entre 1 à 6 μm , le rendement augmente linéairement avec un taux de 0,5% / μm . Toutefois, une nouvelle augmentation de l'épaisseur du CuInSe₂ au-delà de 6 μm n'améliore pas le rendement, c'est en raison du coefficient d'absorption élevé du CuInSe₂.

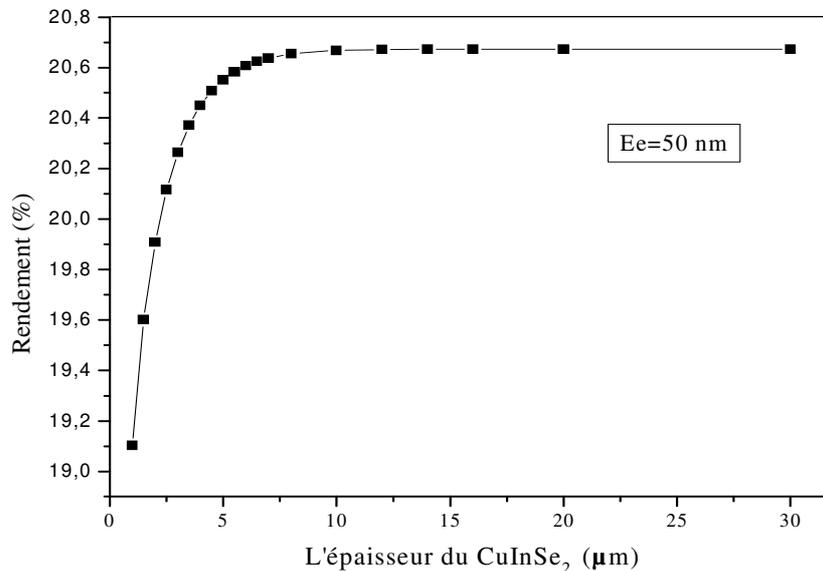


Figure (III.3) : La variation du rendement de la cellule solaire CuInSe₂ en fonction de l'épaisseur de la couche absorbante [2].

L'épaisseur de la couche absorbante suffisante pour absorber tous les photons incidents du spectre solaire varie avec la longueur de diffusion L_n des porteurs minoritaires telle qu'il est montré sur la figure (III.4), où nous remarquons que l'augmentation de la longueur de diffusion a un effet

direct sur l'amélioration du rendement de la cellule où nous trouvons que la valeur optimale de l'épaisseur de la base, pour laquelle le rendement est optimal, varie selon L_n de $2.5\mu\text{m}$ - $10\mu\text{m}$.

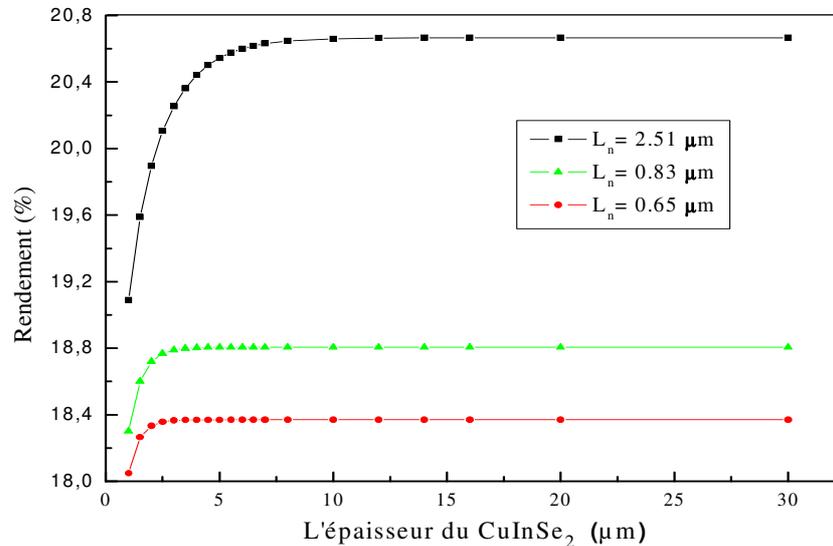


Figure (III.4): La variation du rendement en fonction de l'épaisseur du CuInSe₂ pour différentes longueurs de diffusion.

La figure (III.5) représente la variation du rendement quantique en fonction des longueurs d'onde pour différentes épaisseurs de la base (Eb). Pour les longueurs d'onde inférieures à 500 nm, qui correspond au gap du CdS ($E=2.42\text{eV}$), l'épaisseur de la base n'a aucune influence sur le rendement quantique de la cellule dont l'épaisseur du CdS a été fixée à 50 nm. Par contre, au delà de 500 nm, le rendement quantique augmente au fur et à mesure que l'épaisseur de la base augmente.

Les figures (III.2) et (III.5) montrent que les épaisseurs des couches du CdS et du CuInSe₂ modifient le rendement quantique de la cellule solaire. La couche CdS influe sur les courtes longueurs d'onde du spectre visible, tandis que la couche CuInSe₂ affecte la région des grandes longueurs d'onde. Il convient de noter que le spectre solaire disponible n'est pas symétrique où l'intensité maximale est située à environ à 1,8 eV qui est plus proche du gap optique du CuInSe₂. Cela justifie la plus grande influence de l'épaisseur du CuInSe₂ sur le rendement quantique de la cellule solaire. Cependant, il n'est pas utile de fabriquer des cellules solaires avec des épaisseurs de base trop grandes car les réponses spectrales commencent à s'entasser.

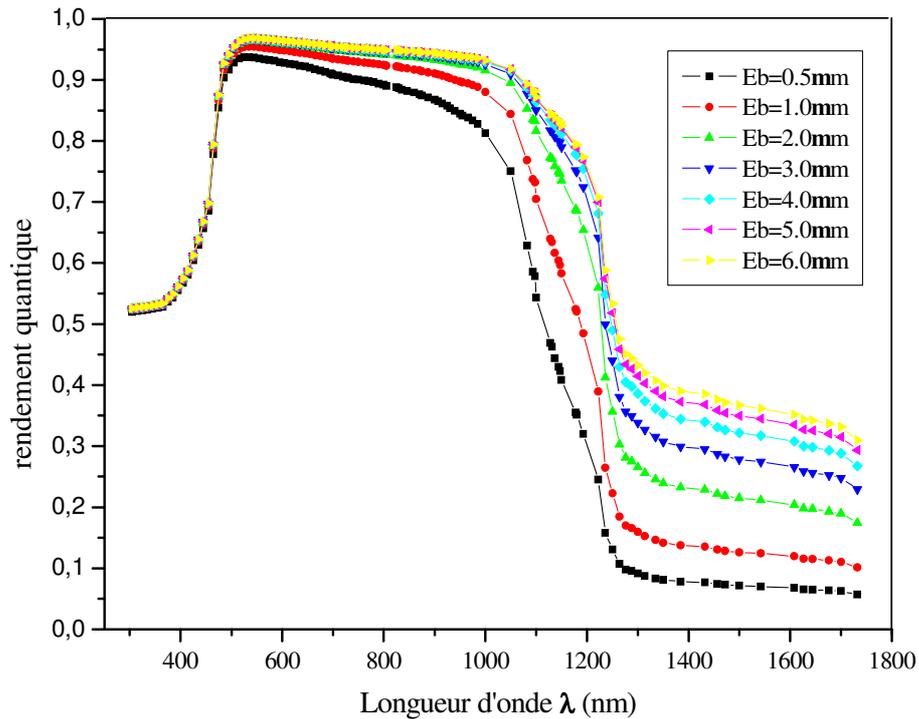


Figure (III.5) : La variation du rendement quantique en fonction des longueurs d'onde incidente pour différentes épaisseurs de la couche de CuInSe_2 [2].

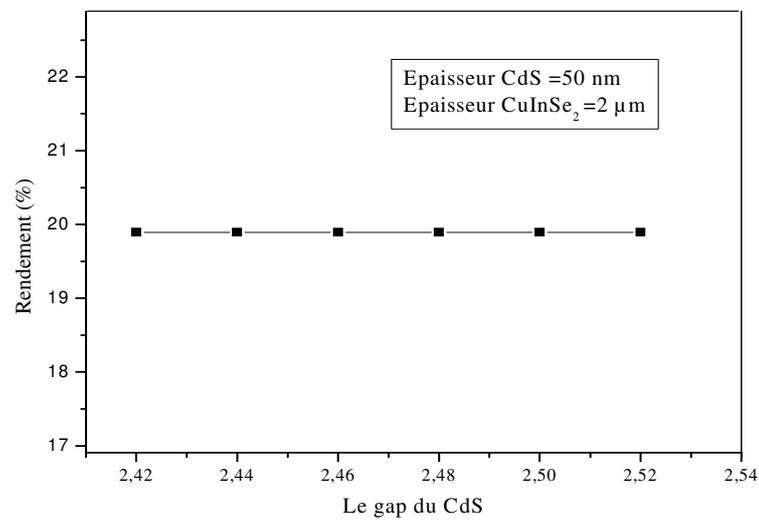
IV. Influence des gaps optiques du CuInSe_2 et du CdS

Les gaps optiques de CdS et CIS peuvent être variés durant le processus de dépôt. Plusieurs techniques ont été utilisées pour préparer des couches minces du CdS à savoir: la pulvérisation cathodique [3], l'évaporation thermique [4], l'électrodéposition [5], la pyrolyse par pulvérisation [6] et le dépôt de bain chimique [7]. Chaque technique possède sa spécification, ce qui influe sur les propriétés physiques du matériau tel que le gap optique qui peut être adapté en faisant varier les paramètres de dépôt (la température du substrat, la puissance, la température, le pH ou la molarité de la solution).

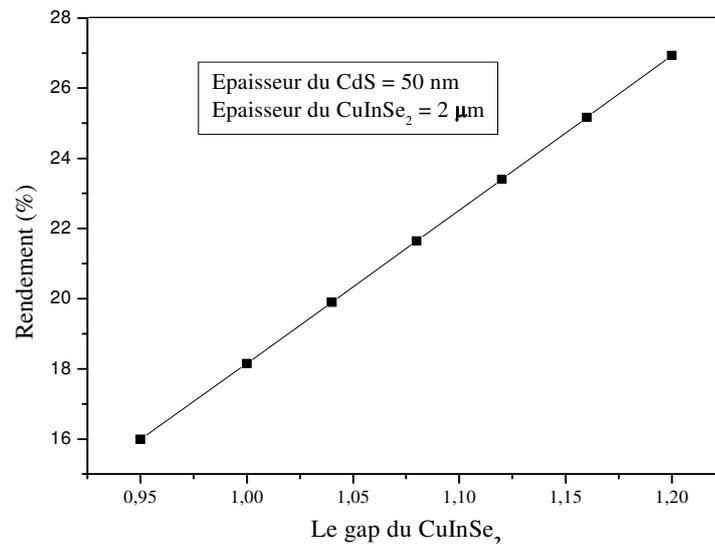
La couche mince du CIS peut être aussi préparée par une variété de différentes techniques de fabrication, tels que l'évaporation sous vide [8], le flash évaporation, l'épitaxie par faisceau moléculaire [9], la pulvérisation [10], l'électrodéposition [11], et les sélénisations précurseurs de Cu-In [12,13]. Ainsi que pour le CdS , son gap optique peut être contrôlé par les paramètres de dépôt et aussi par un ajout de Ga ou de S . Un alliage avec le Ga [14], l' Al [15] ou le S [16]

augmente la largeur de bande de CuInSe_2 et le rend plus adapté au dispositif avec un haut rendement.

Nous avons investi l'influence des bandes interdites des deux couches tampon et absorbante. Sur les figures (III.6 et III.7) nous avons rapporté la variation du rendement des cellules solaires en fonction des gaps du CdS et du CuInSe_2 , respectivement. Les épaisseurs du CdS et du CuInSe_2 sont fixées à 50 nm et 2 μm . Nous avons varié le gap du CdS dans la gamme (2,42 -2,54 eV) et du CuInSe_2 dans la gamme (0,95 -1,20eV). Ces gammes sont choisies après une synthèse des données compilées à partir de la littérature [17,18].



Figures (III.6) : Le rendement en fonction du gap du CdS [2].



Figures (III.7) : Le rendement en fonction du gap du CuInSe_2 [2].

L'influence du gap optique du CdS sur le rendement est insignifiante. Cependant, le gap de la couche absorbante CuInSe₂ est plus déterminant, où nous remarquons que le rendement de la cellule augmente linéairement avec le gap de la couche du CuInSe₂. Pour un gap de 1.20 eV, le rendement atteint la valeur de 27% et il s'approche donc, de l'optimum théorique pour la conversion de l'énergie solaire [19].

Afin de valider nos résultats, une comparaison avec d'autres résultats expérimentaux est nécessaire. Les figures (III.8) et (III.9) représentent les résultats expérimentaux et calculés de la caractéristique (J-V) et du rendement quantique d'une cellule solaire CuInSe₂, respectivement. Les données expérimentales sont prises de la référence [20]. Les figures (III.8 et III.9) et le tableau (III.1) montrent un bon accord entre les résultats expérimentaux et ceux obtenus par calcul, ce qui permet la validation du modèle et la procédure de calcul utilisés.

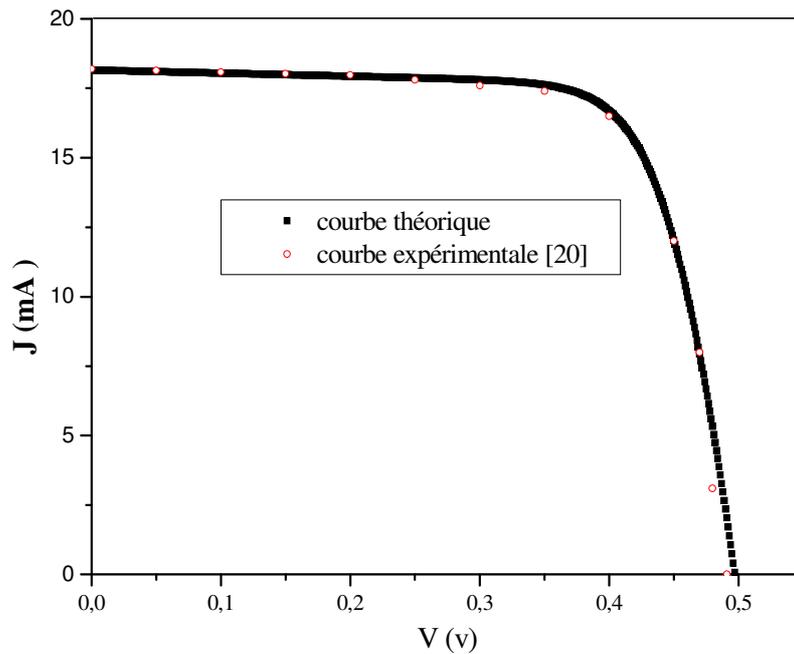


Figure (III.8) : La courbe J-V calculée de la cellule CuInSe₂ comparée aux résultats expérimentaux [2].

Les paramètres utilisés dans les calculs qui nous ont permis d'avoir un meilleur accord entre la courbe théorique et expérimentale sont les suivants :

$$R_s=1.55 \Omega, \quad R_{sh}=900 \Omega, \quad R=0.04, \quad L_{nCuInSe2} =2.61\mu m, \quad L_{pCdS}= 0.46 \mu m, \quad D_{opp} = 10^{21} m^{-3}, \\ D_{opn} =8*10^{20} m^{-3}, \quad E_g CuInSe2=1.03 eV, \quad E_{pCdS}=50 nm, \quad E_{pCuInse2} = 3 \mu m.$$

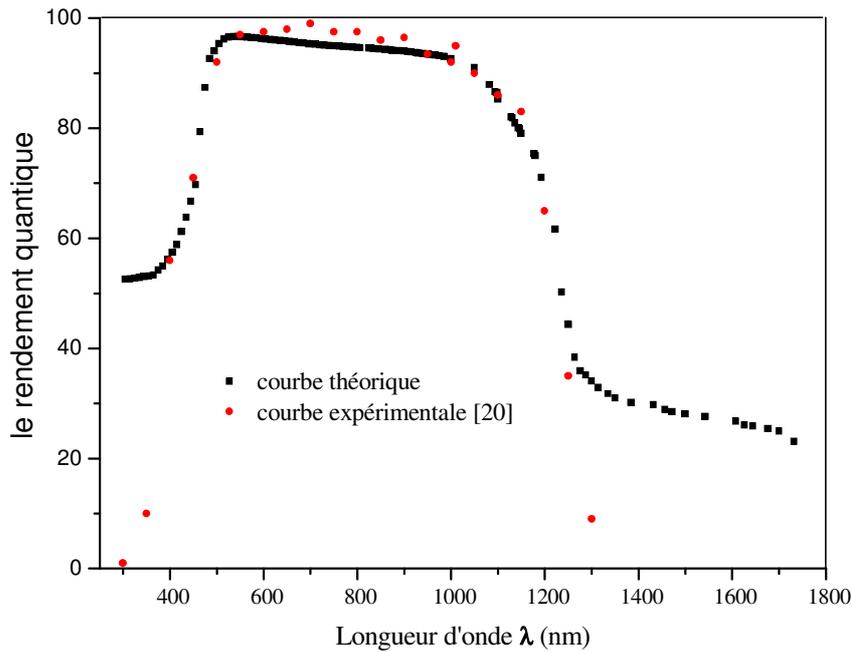


Figure (III.9) : Le rendement quantique calculé de la cellule CuInSe_2 comparé aux résultats expérimentaux [2].

	surface (cm^2)	V_{co} (v)	J_{cc} (mA/cm^2)	Facteur de Forme FF (%)	Rendement (%)
Résultats théoriques	0,447	0,497	40,613	71,58	14,55
Résultats expérimentaux [20]	0,447	0,491	41,1	71,9	14,5

Tableau (III.1): Comparaison entre les résultats de simulations et ceux mesurés [2]

V. Influence du taux de Gallium

L'importance de la bande interdite de la couche absorbante est incontestable pour améliorer les performances des cellules solaires, en raison de son impact sur l'absorption et par conséquent, sur la génération des porteurs électron-trou. Pour augmenter la largeur de la bande interdite du CIS à des valeurs plus convenables et adaptées au spectre solaire AM1.5, les composés du CuInSe_2 sont alliés avec le gallium. Le gap du matériau résultant CIGS ($\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$) varie en fonction du rapport $[\text{Ga}]/[\text{In}]$ entre 1,04 (CIS) et 1,68 (CGS). La variation du rapport $[\text{Ga}]/[\text{In}+\text{Ga}]$, dénoté x , affecte différents paramètres du matériau (CIGS) tels que la bande interdite [21], le coefficient d'absorption [22], la concentration de défauts [23], etc. Les effets de l'augmentation de la largeur de bande de ce matériau ont été largement étudiés par plusieurs auteurs [24, 25].

Dans ce qui suit, nous allons étudier l'effet du taux de gallium (x) dans le $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ sur les performances de la cellule. L'épaisseur de l'absorbeur est fixée à $2\mu\text{m}$, et le taux de gallium, x , varie de 0 à 1 en utilisant le logiciel SCAPS-1D qui nous permet d'obtenir les taux de génération et de recombinaison afin de mieux interpréter les résultats obtenus.

La figure (III.10) représente les performances de la cellule en termes de J_{cc} , V_{co} , FF, et du rendement en fonction du taux de gallium dans le (CIGS) $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$. Les résultats obtenus par simulation et d'autres expérimentaux obtenus par [26] montrent des tendances semblables

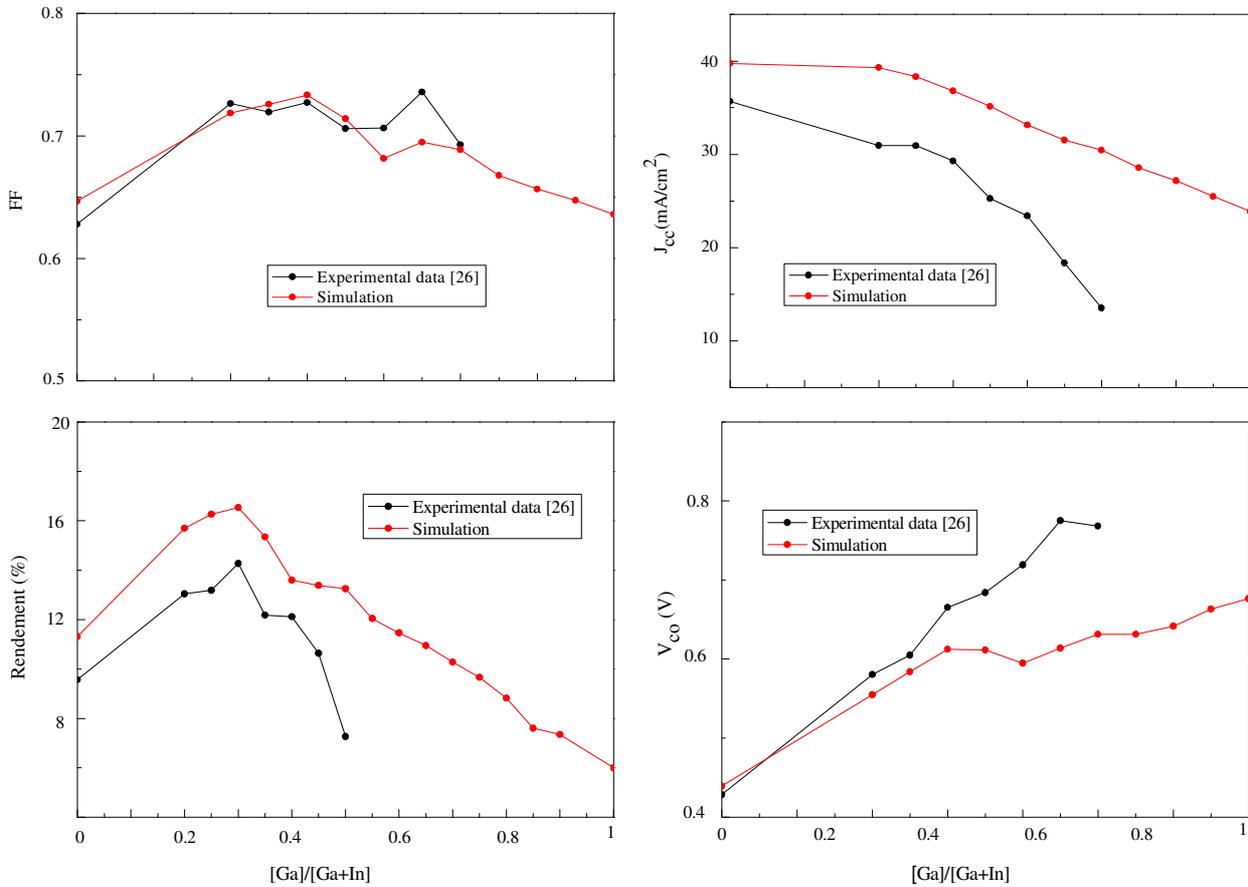


Figure (III.10) : Les performances de la cellule en fonction du taux de gallium Ga [27].

La diminution de la densité de courant en fonction de Ga est relativement linéaire. Cette diminution peut être attribuée à l'augmentation du Ga qui réduit le taux de génération, au niveau de la jonction p-n et au niveau du volume du CIGS, figure (III.11 (a)), à cause de l'augmentation de la bande interdite qui réduit l'absorption [28] dans la gamme des longues longueurs d'onde du spectre solaire. Aussi d'après la figure (III.11 (a)) qui représente la variation du taux de génération en fonction de la profondeur de la couche absorbante pour différents taux de gallium, nous

remarquons que la majorité des photons incidents sont absorbés dans les régions très proches à la surface (à la jonction p-n). La tension de circuit ouvert (V_{co}) dépend essentiellement de la valeur de la bande interdite, surtout dans les régions de recombinaison telle que la zone de charge d'espace où le fort gap mène à une atténuation de la recombinaison des porteurs dans le matériau.

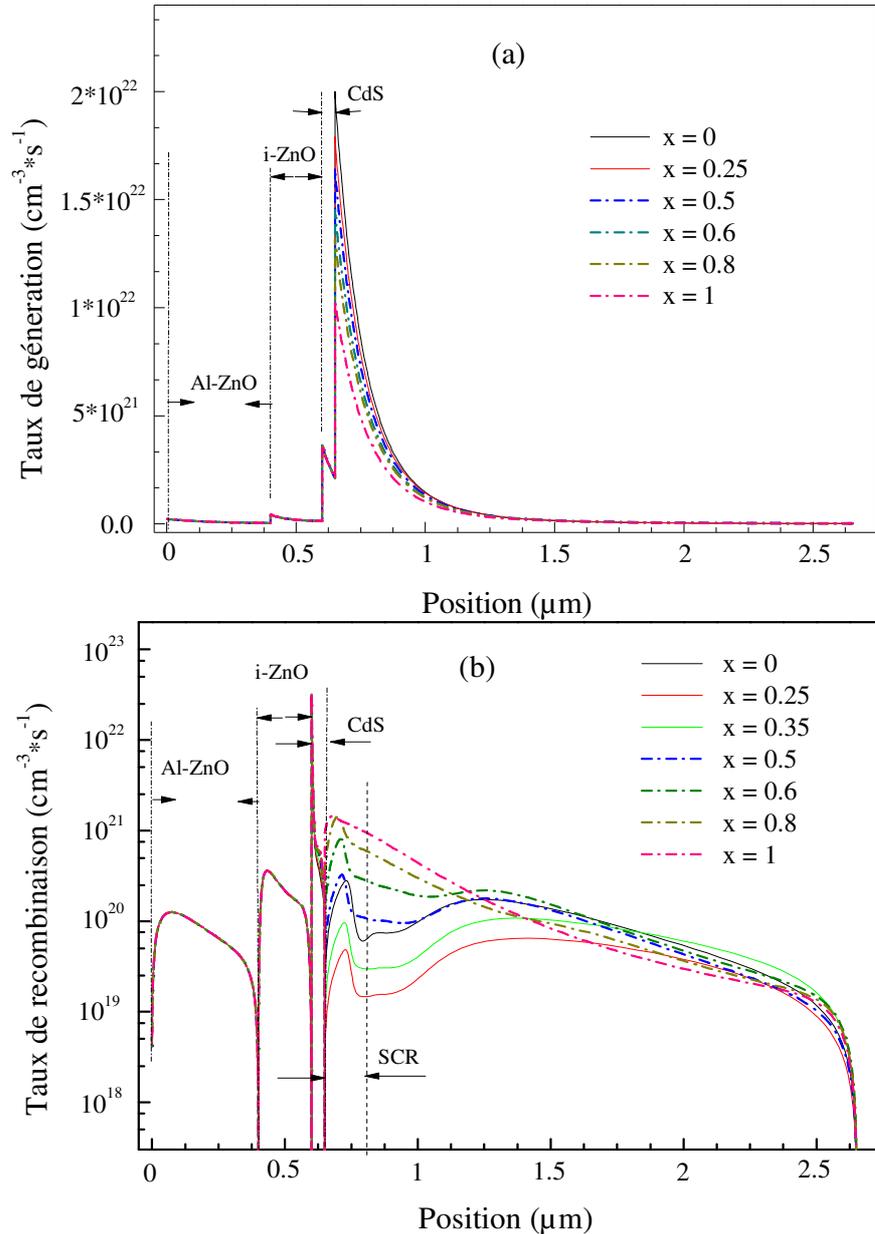


Figure (III.11) : Les courbes de distribution en fonction de la position de (a) le taux de génération des porteurs et (b) le taux de recombinaison en fonction du rapport $[\text{Ga}]/[\text{Ga}+\text{In}]$, dénoté (x) [27].

Nous observons sur la figure (III.10) l'augmentation du V_{co} avec le taux de Gallium. Pour des taux de gallium élevés, bien que l' E_g augmente, le V_{co} reste relativement constant à cause de

l'augmentation du taux de recombinaison surtout dans la zone de charge d'espace et la zone adjacente, comme montre la figure (III.11, (b)) où le mécanisme de recombinaison dans la zone de charge d'espace devient le processus le plus dominant, en raison de défauts qui augmentent avec la présence du Gallium dans le matériau (Figure III.12) ce qui limite l'augmentation du V_{co} .

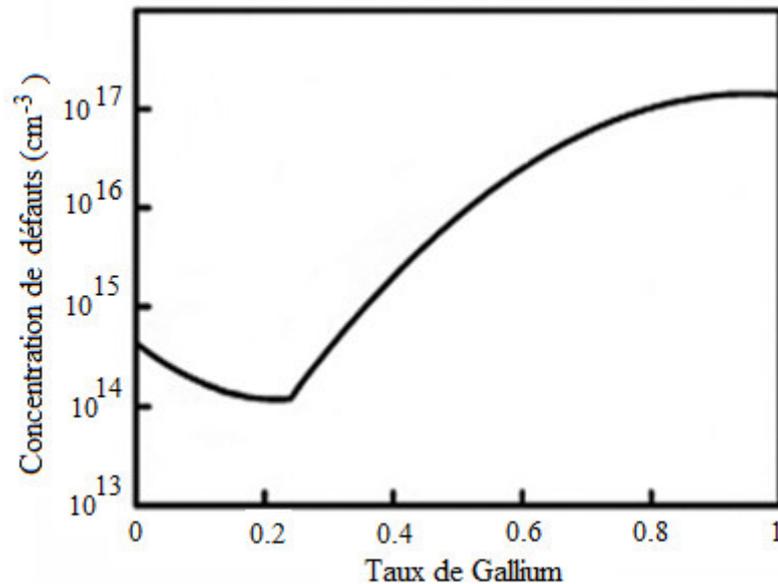


Figure (III.12) : La variation de la concentration de défauts en fonction du taux de gallium, x [23].

Le rendement de la cellule ainsi que le FF atteignent une valeur maximale lorsque le taux du gallium (x) dans le matériau prend une valeur égale à 0,3 (30%). Cette valeur est semblable à celles reportées par d'autres auteurs [28, 29]. Au-delà de cette valeur (x = 0,3), l'augmentation de ce rapport (x) devient nuisible et le rendement commence à fléchir. La diminution drastique du rendement peut être attribuée aux défauts dans le CIGS.

VI. Conclusion

Nous venons de présenter un travail de modélisation qui nous a permis d'étudier l'influence de l'épaisseur et du gap des deux semi-conducteurs constituant une cellule solaire CdS/CuInSe₂ sur le rendement de celle-ci. Les résultats obtenus montrent que les épaisseurs des couches du CdS et du CuInSe₂ modifient le rendement quantique et le rendement de puissance de la cellule. Les performances de la cellule sont meilleures pour une épaisseur réduite du CdS et une valeur optimale de l'épaisseur du CuInSe₂ variant entre 2,5 et 10 μm dépendant de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires. L'influence du gap optique du CdS sur le rendement est insignifiante. Cependant, le gap de la couche absorbante CuInSe₂ est plus déterminant, où le

rendement atteint la valeur de 27%. Ceci d'une part, d'autre part, les résultats obtenus par le SCAPS-1D montrent l'effet bénéfique de l'ajout du gallium sur les performances de la cellule où le rendement atteint une valeur optimale lorsque le taux du gallium dans le matériau CIGS prend une valeur de (30%).

Références chapitre III

- [1] K. W. Böer, « Cadmium sulfide enhances solar cell efficiency », *Energy Conversion and Management*, Vol. 52, 2011, pp. 426.
- [2] N. Touafek, M. S. Aida and R. Mahamdi, « CuInSe₂ Solar Cells Efficiency Optimization », *American Journal of Materials Science*, Vol. 2, 2012, pp. 160.
- [3] J. Pouzet, J. C. Benede, A. Khellil, H. Essaidi and S. Benhida, « CdS thin films growth by ammonia-free chemical bath deposition technique », *Thin Solid Films*, Vol. 208, 1992, pp.252.
- [4] R. Inov and D.Desheva, « Influence of substrate temperature on thermally evaporated CdS thin film properties », *Thin Solid Films*, Vol. 213, 1992, pp. 230.
- [5] R. P. Raffaele, H. Forsell, T. Potdevin, R. Fridefeld, J. G. Mantovani, S. G. Bailey, S. M. Hubbard, E. M. Gordon and A. F. Hepp, « Electrodeposited CdS on CIS pn junctions », *Solar Energy Materials and Solar Cells*, Vol. 57, 1999, pp. 167.
- [6] K. S. Ramaiah and V. S. Raja, « Preparation and characterization of all spray-deposited p-CuIn(S_{0.5}Se_{0.5})₂/n-CdZnS:In thin film solar cells », *Solar Energy Materials and Solar Cells*, Vol. 32, 1994, pp. 1-6.
- [7] M. T. S. Nair, P. K. Nair, R. A. Zingaro and E. A. Meyers, « Conversion of chemically deposited photosensitive CdS thin films to n type by air annealing and ion exchange reaction », *J. Appl. Phys*, Vol. 75, 1994, pp.1557.
- [8] L. L. Kazmerski, M. S. Ayyagari, F. R. White and G. A. Sanborn, « Growth and properties of vacuum deposited CuInSe₂ thin films », *J. Vac. Sci.Technol.*, Vol. 13, 1976, pp. 139.
- [9] S. P. Grindle, A. H. Clark, S. Rezaie Serej, E. Falconer, J. McNeily and L. L.Kazmerski, « Growth of CuInSe₂ by molecular beam epitaxy », *J. Appl. Phys.* , Vol. 51, 1980, pp. 5464.
- [10] T. Yamaguchi, J. Matsufusa, H. Kabasawa and A. Yoshida, « Thin films of CuInSe₂ produced by sputtering with intentional oxygen doping », *J. Appl. Phys.*, Vol. 69, 1991, pp. 7714.

- [11] A. M. Fernandez, P. J. Sebastian, R. N. Bhattacharya, R. Noufi, M. Contreras and A. M. Hermann, «An 8% CuInSe₂ based solar cell formed from an electrodeposited precursor film», *Semicond. Science and Technology*, Vol. 11, 1996, pp. 964.
- [12] T. Nakada and A. Kunioka, « Sequential Sputtering/Selenization Technique for the Growth of CuInSe₂ Thin Films », *Jpn. J. Appl. Phys.*, Vol. 37, 1998, pp. L 1065.
- [13] S. Zweigart, S.M. Sun, G. Bilger and H. W. Schock, « CulnSe₂ film growth using precursors deposited at low Temperature », *Solar Energy Materials and Solar Cells*, Vol. 41-42, 1996, pp. 219.
- [14] W. N. Shafarman, R. Klenk and B. E. McCandless, « Device and material characterization of Cu(InGa)Se₂ solar cells with increasing band gap », *J. App. Phys.*, Vol. 79, 1996, pp. 7324.
- [15] P. D. Paulson, M. W. Haimbodi, S. Marsillac, R.W. Birkmire and W.N. Shafarman, « CuIn_{1-x}Al_xSe₂ thin films and solar cells », *J. Appl. Phys.* Vol.91, 2002, pp.10153.
- [16] M .Engelmann, B. E. McCandless and R.W. Birkmire, « Formation and analysis of graded CuIn(Se_{1-y} -S_y)₂ films », *Thin Solid Films*, Vol. 387, 2001, pp.14.
- [17] C. Deokjoon, N. K. Huang and K. Sunmi, « The Optical Property of CPD Prepared CdS Films », *Journal of Wuhan University of Technology*, Vol.19, 2004, pp. 1-3.
- [18] G. Pankaj, J. C. Garg and A.C. Rastogi, « optical properties of electrodeposited CuInSe₂ thin films », *Thin Solid Films*, Vol. 192, 1990, pp.5.
- [19] A. Jehad, A. AbuShama, R. Noufi, S. Johnston, S. Ward and X. Wu, « Improved performance in CuInSe₂ and surface-modified CuGaSe₂ (CGS) thin film solar cells », *Proceedings of the 31st IEEE Photovoltaic Specialists Conference*, Lake Buena Vista, Florida, 2005.
- [20] A. Jehad, A. M. Abushama, S. Johnston, T. Moriarty, G. Teeter, K. Ramanathan and R. Noufi, « Properties of ZnO/CdS/CuInSe₂ Solar Cells with Improved Performances », *Progress in photovoltaics: Research and Applications*, Vol. 12, 2004, pp.39.
- [21] P. D. Paulson, R. W. Birkmire and W. N. Shafarman, « Optical characterization of Cu(In,Ga)Se₂ alloy thin films by spectroscopic ellipsometry », *Journal of Applied Physics*, Vol.94, 2003, pp. 879.

- [22] J. E. Jaffe and A. Zunger, « Theory of the band-gap anomaly ABC2 chalcopyrite compounds », Physical Review B, Vol. 29, 1984, pp. 1882.
- [23] G. Hanna, A. Jasenek, U. Rau and H.W. Schock, « influence of the Ga-content on the bulk defect densities of Cu(In,Ga)Se₂ », Thin Solid Film, Vol. 387, 2001, pp. 71.
- [24] M. Gloeckler and J.R. Sites, « Efficiency limitations for wide-band-gap chalcopyrite solar cells », Thin Solid Films, Vol. 480-481, 2005, pp. 241.
- [25] J. Song, Sheng S. Li, C. H. Huang, O. D. Crisalle and T. J. Anderson. « Device modeling and simulation of the performance of Cu(In_{1-x},Ga_x)Se₂ solar cells», Solid-State Electronics, Vol. 48, 2004, pp.73.
- [27] N. Touafek and R. Mahamdi, « Impact of [Ga]/[In+Ga] Ratio on the Generation-Recombination Rates of Cu(In,Ga)Se₂ Solar Cells », Proceedings of Engineering and Technology – PET, Conférence Internationale des énergies renouvelables CIER-2014.
- [26] A. O. Pudov, « Impact of secondary barriers on CuIn_{1-x}Ga_xSe₂ solar-cell operation», Thèse de Doctorat, Colorado state University, 2005.
- [28] C. H. Huang, « Effects of Ga content on Cu(In,Ga)se₂ solar cells studied by numerical modeling », Journal of physics and chemistry of solids, Vol. 69, 2008, pp. 330.
- [29] S. Ouédraogo, F. Zougmore and J. M. Ndjaka, « Numerical Analysis of Copper-IndiumGallium Diselenide- Based Solar Cells by SCAPS-1D », International Journal of Photoenergy, 2013.

Chapitre IV :

*Influence de la forme d'un gradient de gap
sur les performances de la cellule*

I. Introduction

Le profil du gap (Band gap profiling) est révélé comme l'un des facteurs les plus intéressants menant à une haute performance des cellules solaires basées sur le CIGS [1]. L'effet de ce facteur sur les cellules solaires CIGS et le profil optimal ont été largement étudiés [2-5] dans les dernières années.

Un gradient de gap qui est obtenu, en faisant varier continuellement les flux de différents éléments du CIGS durant le processus de dépôt, fournit des champs supplémentaires qui se construisent dans l'absorbeur de type "p" de la cellule solaire CIGS et qui dépendent des valeurs du gap tout au long de l'épaisseur. Il est en fait, capable d'éliminer ou de minimiser l'effet de la vitesse de recombinaison [6], en aidant la séparation et le transport des électrons-trous photogénérés [7], ce qui améliore les performances de la cellule CIGS [8, 9]. Donc, les performances de la cellule seront affectées par la forme de cette variation dans l'absorbeur. Ainsi, le profil de la bande interdite joue un rôle vital sur les performances de la cellule [9]. La difficulté de contrôler parfaitement le rapport [Ga]/[In] durant le processus de dépôt mène à une variation inévitable de la forme du profil de gap, ce qui influe sur les performances de la cellule car ces derniers sont sensiblement affectés par le rapport [Ga]/[In] [10]. Par conséquent, la différence apparaît parfois entre les résultats expérimentaux et ceux de simulation peut être expliquée par la variation de la forme du profil de gap pendant le processus de dépôt.

Dans ce chapitre, on se propose d'apporter notre contribution dans l'étude des tendances des performances de la cellule si une mauvaise linéarité se produit. Pour cela, deux types de profils de gap sont proposés : profil proche de linéaire et profil de Fermi.

II. Profils proposés

Pour étudier l'effet de la forme du gap sur les performances de la cellule différents profils peuvent être proposés. Dans ce chapitre, deux types de profil de bande interdite sont simulés numériquement en utilisant le logiciel de simulation unidimensionnelle AMPS.

II.1. Profil proche du linéaire

Pour simuler une variation d'un gap volumique supposé proche du linéaire, nous avons utilisé une relation de la forme suivante:

$$E_g(X) = E_{gfront} + (E_{gback} - E_{gfront})(X/E)^\alpha \quad (IV.1)$$

Où:

Le facteur de forme α , de valeur proche de l'unité, décrit un éventuel écart à la linéarité. Il varie entre 0.25 et 2: pour $\alpha = 1$ le profil est dit linéaire. Il devient supralinéaire pour $\alpha < 1$ et sublinéaire si $\alpha > 1$.

E_{gfront} et E_{gback} sont les gaps du CIGS à la jonction et au contact arrière, respectivement. La profondeur (X) dans l'absorbeur est la variable qui décrit le profil. E : étant l'épaisseur du CIGS, prise égal à $2 \mu\text{m}$.

II.2. Profil de Fermi

Ce profil est défini par l'expression du profil de Fermi donnée comme suit :

$$E_g(X) = E_{gback} - (E_{gback} - E_{gfront})[1 + \exp\beta(X - X_0)]^{-1} \quad (\text{IV. 2})$$

β : décrit la forme du profil et X_0 c'est le point d'inflexion (voir figure IV.8).

Pour étudier l'effet de ces profils proposés sur les performances de la cellule par AMPS-1D, la couche à gradient de gap était divisée en sous couches d'épaisseurs égales ou différentes où le nombre de sous couches utilisées dépend de la complexité du profil.

III. Gradient de gap inverse

Dans cette partie nous nous focalisons sur l'étude de l'influence du gradient de gap avec un profil proche du linéaire dans la région frontale sur les performances de la cellule. Pour mettre en évidence cette influence sur les performances de la cellule, trois valeurs du paramètre α ont été choisies (voir figure (IV.1)). D'après l'équation (IV.1), $\alpha = 1$ (profil linéaire), $\alpha = 1.5$ (profil sublinéaire) et $\alpha = 0.5$ (profil supralinéaire).

La largeur de la zone de charge d'espace calculée par le logiciel AMPS-1D est de $0,35\mu\text{m}$. L' E_{gfront} (gap frontal) est pris égal à $1,28 \text{ eV}$ avec une distance sur la quelle le gap est graduel voire $d = 0,25\mu\text{m}$.

Les résultats de simulation des structures étudiées, qui montrent un bon accord avec les valeurs citées par [9] (tableau (IV.1)), présentent une différence non négligeable entre les performances des profils proposés, à cause des défauts dans le matériau qui varient en fonction de la bande interdite [11].

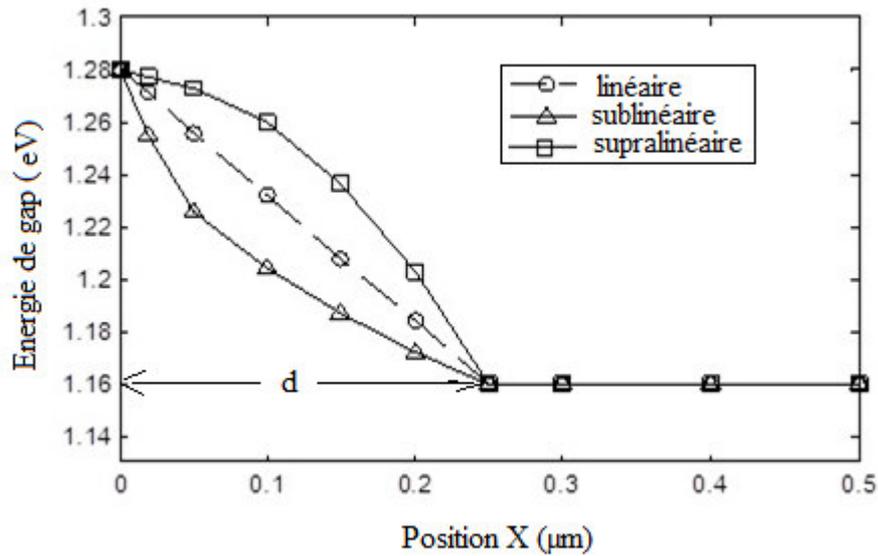


Figure (IV.1) : Diagramme de bande des profils étudiés.

Le profil sublinéaire montre une augmentation du rendement de 0,2% par rapport au profil linéaire. En revanche, le profil supralinéaire montre une diminution de 1%, due à la diminution du facteur de forme malgré l'augmentation notable du V_{co} .

Profil	J_{cc} (mA/cm ²)	V_{co} (V)	FF	η (%)
Linéaire	31,481	0,593	0,788	14,714
Sublinéaire	31,466	0,591	0,803	14,928
Supralinéaire	31,402	0,603	0,734	13,889

Tableau (IV.1): Les paramètres électriques de la cellule des profils étudiés.

Pour mieux illustrer l'effet du profil de gap sur les performances de la cellule, deux paramètres essentiels ont été étudiés : la distance sur laquelle le gap est gradient (d) (voir figure (IV.1)) et la valeur de la bande interdite au niveau de la jonction $E_{g_{front}}$.

III.1. Influence de la distance de gradient de gap

Nous évaluons dans cette partie l'impact de la distance de gradient de gap sur les profils étudiés (voir figure IV.1). Les résultats de la simulation sont présentés sur la figure (IV.2) où les paramètres électriques (V_{co} , J_{cc} , FF et le rendement) sont en fonction de la distance de gradient de gap (d), avec un gap frontal $E_{g_{front}} = 1,28$ eV. Pour des faibles distances $d \sim 0,12$ μm tous les paramètres sont très proches. Cependant, avec l'augmentation de (d) une différence entre les

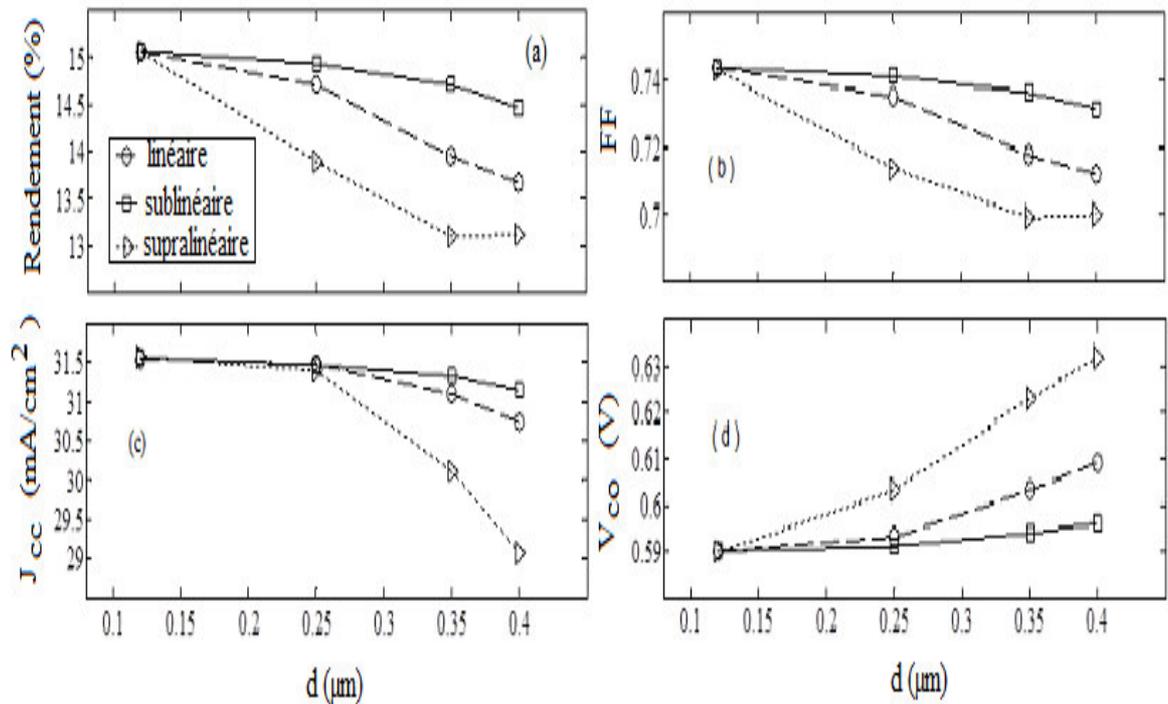


Figure (IV.2): Les performances de la cellule en fonction de la distance de gradient de gap, (a) le rendement de conversion, (b) facteur de forme, (c) la densité du courant de court-circuit, (d) tension du circuit ouvert [12].

profils étudiés apparaît où nous notons un accroissement du rendement du profil sublinéaire au dessus du rendement du profil linéaire. Par contre, le rendement du supralinéaire diminue au dessous du linéaire.

Nous constatons également, que le rendement de la cellule sur la figure (IV.2 (a)) décroît avec l'augmentation de d . Le sublinéaire présente le meilleur profil comparé à ceux du linéaire et supralinéaire, où nous remarquons à la limite de la ZCE, une baisse de 0,8% qui a touché le profil supralinéaire et une augmentation de 0,7% pour le profil sublinéaire comparé au rendement du profil linéaire. Le rendement de la cellule pour un profil sublinéaire diminue respectivement, de 0,36% et 0,6% avec d à la limite et au-delà de la ZCE, respectivement, contrairement aux profils linéaire et supralinéaire où les diminutions atteignent 1% et 1,38% à la limite et au-delà de la zone de charge d'espace pour le premier profil et 2% pour le second.

La figure (IV.2 (b)), présente le facteur de forme en fonction de d qui augmente avec la diminution de d [13]. La différence entre les différents profils étudiés devient négligeable lorsque d est petit. Mais, plus ce dernier augmente cette différence devient plus importante.

Sur la figure (IV.2 (c)), nous constatons que pour une valeur de $d=0,7$ de la largeur de la ZCE, le J_{cc} reste presque constant pour les trois profils. Mais, au-delà de cette valeur la différence devient significative. La diminution du J_{cc} du profil supralinéaire est due au gap fort au-delà de ZCE, parce que dans cette région le J_{cc} dépend essentiellement du gap qui doit être faible. En outre, nous notons que plus d est grande, le V_{co} (figure (IV.2 (d))) augmente, surtout le profil supralinéaire, qui augmente à peu près de 0,04 V.

III.2. Influence d' E_{gfront}

L'influence de l' E_{gfront} sur les performances de la cellule, pour les trois profils proposés, est illustrée sur la figure (IV.3). La distance de gradient de gap est prise égale à $0,25\mu m$ et le gap E_{gfront} est varié entre 1,20 et 1,36 eV. Pour un E_{gfront} supérieur à 1,28 eV, bien que le V_{co} augmente, la diminution de J_{cc} limite l'augmentation du rendement, en raison des défauts qui augmentent avec l'accroissement d' E_g , pour $x > 0,4$ [14].

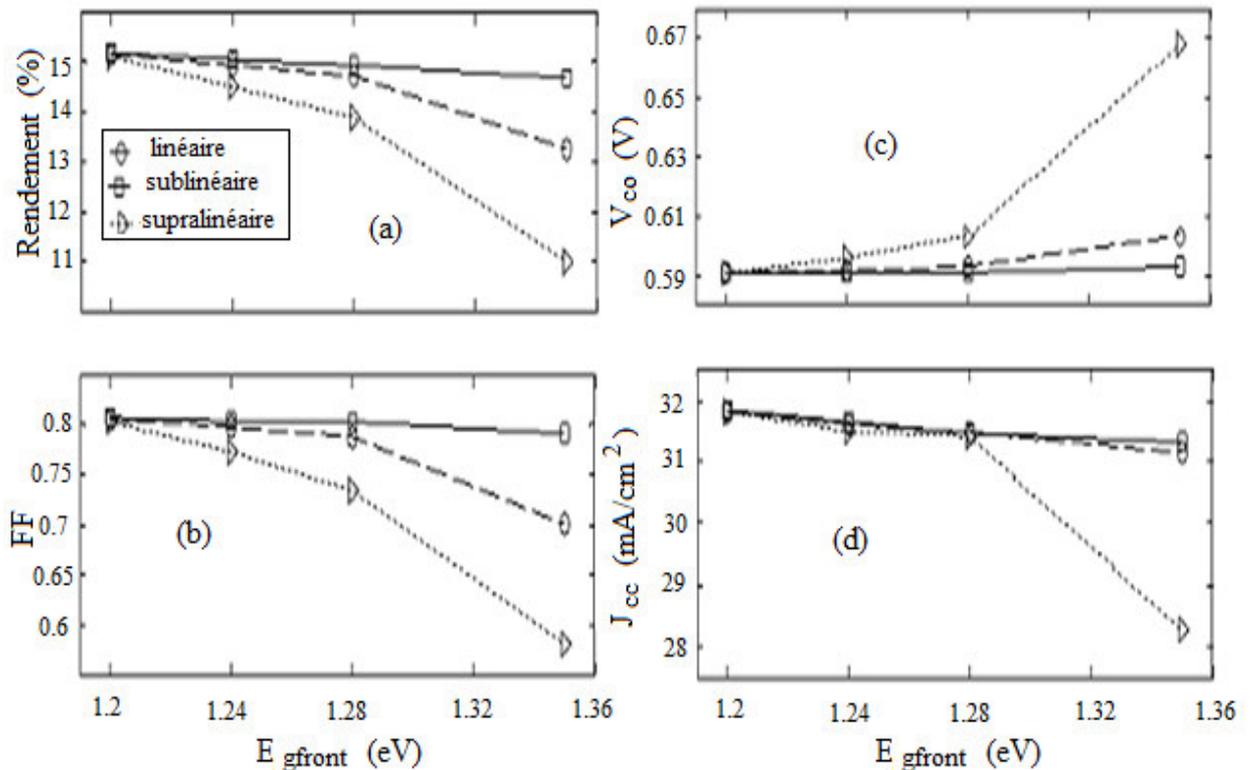


Figure (IV.3): L'effet d' E_{gfront} sur les performances de la cellule CIGS, profil linéaire, sublinéaire et supralinéaire. (a) le rendement de conversion (η), (b) le facteur de forme, (c) la tension du circuit ouvert, (d) la densité du courant de court-circuit [12].

Sur la Figure (IV.3 (a)), la différence du rendement entre les trois profils devient plus importante pour des gaps frontaux élevés où le rendement diminue de 1,4% en passant du profil sublinéaire au profil linéaire et de 2,2% du linéaire au supralinéaire pour $E_{g\text{front}} = 1,35$ eV. Cependant, sur la figure (IV.3 (d)) qui représente la variation du J_{cc} en fonction de l' $E_{g\text{front}}$, nous notons une influence remarquable du $E_{g\text{front}}$ exception pour le profil supralinéaire où le fort gap existant dans la ZCE minimise les absorptions dans cette région, ce qui mène à une augmentation notable du V_{co} pour le profil supralinéaire comme montre la figure (IV.3 (c)).

Pour mieux illustrer l'effet de ces deux paramètres ($E_{g\text{front}}$ et d), ces derniers ont été variés à la fois. Les résultats de simulation sur la figure (IV.4)), qui représentent le rendement des trois profils en fonction d' $E_{g\text{front}}$ et de (d), montrent que pour tous les profils le rendement diminue avec l'augmentation de (d) et d' $E_{g\text{front}}$. En revanche, les faibles valeurs de (d) et d' $E_{g\text{front}}$ donnent un rendement maximal des profils étudiés où la différence est négligeable entre eux. En outre, l'influence d' $E_{g\text{front}}$ et de (d) sur le rendement du profil supralinéaire est plus décisive que le profil linéaire et le profil sublinéaire. Ce dernier profil est moins sensible aux variations de ces paramètres. Pour des valeurs élevées de (d) et d' $E_{g\text{front}}$ nous notons une diminution d'environ 1,2%, 2,5% et 3,5% pour les profils sublinéaire, linéaire et supralinéaire, respectivement.

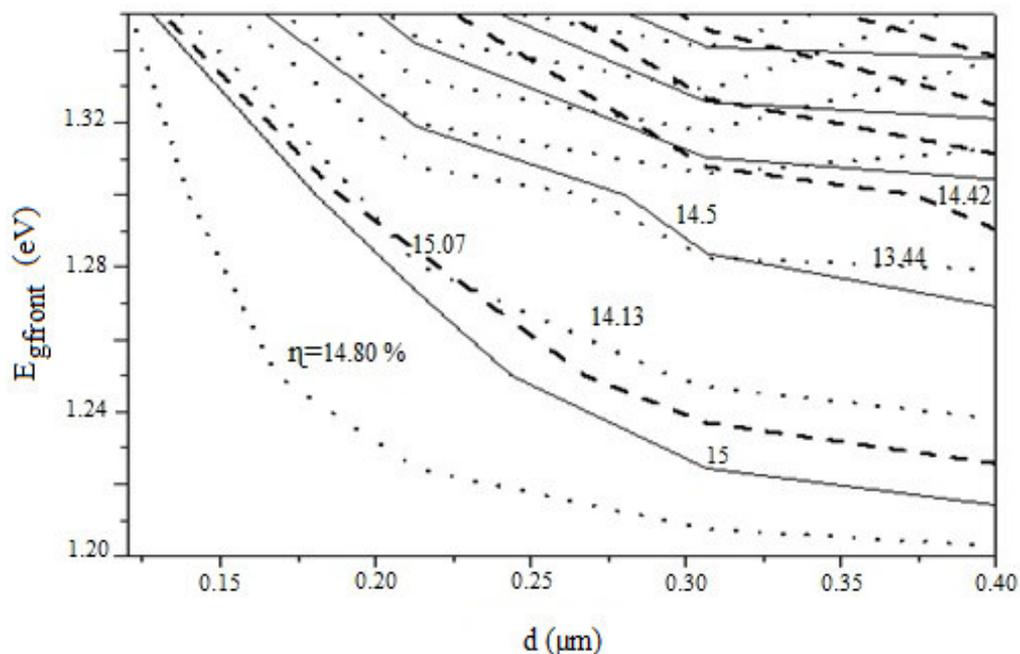


Figure (IV.4): Le rendement en fonction de $E_{g\text{front}}$ et la distance de gradient de gap (d), le profil sublinéaire (tirés), les profils linéaire et supralinéaire (lignes solides et pointues), respectivement [12].

IV. Gradient de gap normal

Le gradient de gap normal est obtenu en diminuant progressivement le gap de l'absorbeur depuis le contact arrière vers la jonction p-n. Dans cette partie, nous avons considéré qu' $E_{g\text{front}}$ et $E_{g\text{back}}$ sont 1,16 et 1,4 eV, respectivement pour tous les cas étudiés. Pour étudier l'influence du profil de gap sur les paramètres électriques de la cellule, deux profils de gap ont été proposés: le profil de Fermi et le profil proche du linéaire.

Les performances de la cellule CIGS des deux profils ont été comparées avec celles du profil de base que l'on assume linéaire en fonction de la position x ($\alpha=1$). Les résultats de ce cas référentiel donnent un rendement de 15,2% [courant de court-circuit (J_{cc}), 32,525mA/cm² ; V_{co} , 0,601 V ; FF, 0,782].

IV.1. Profil proche du linéaire

Pour étudier l'effet du profil de gap proche du linéaire, plusieurs structures qui varient en fonction de α selon l'équation (IV.1) sont illustrées sur la figure (IV.5). Nous évaluons, dans cette partie, l'impact du facteur de forme α sur les performances de la cellule solaire CIGS.

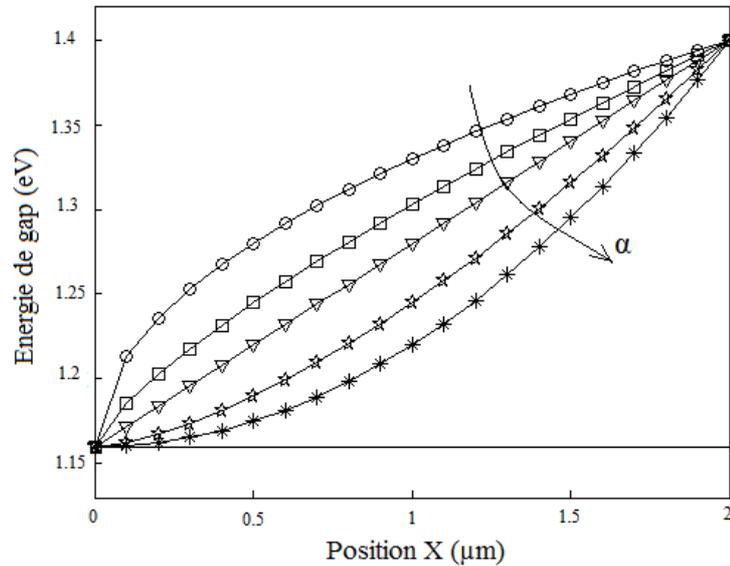


Figure (IV.5) : Les différents profils proches du linéaire dans l'absorbeur CIGS.

Les performances de la cellule ayant un profil de gap proche du linéaire ont été normalisées à celles de la cellule ayant un profil de gap linéaire ($\alpha=1$). Les résultats obtenus sont présentés sur la figure (IV.6) en termes de V_{co} , J_{cc} , FF, et rendement en fonction de α qui varie de 0,25 à 2.

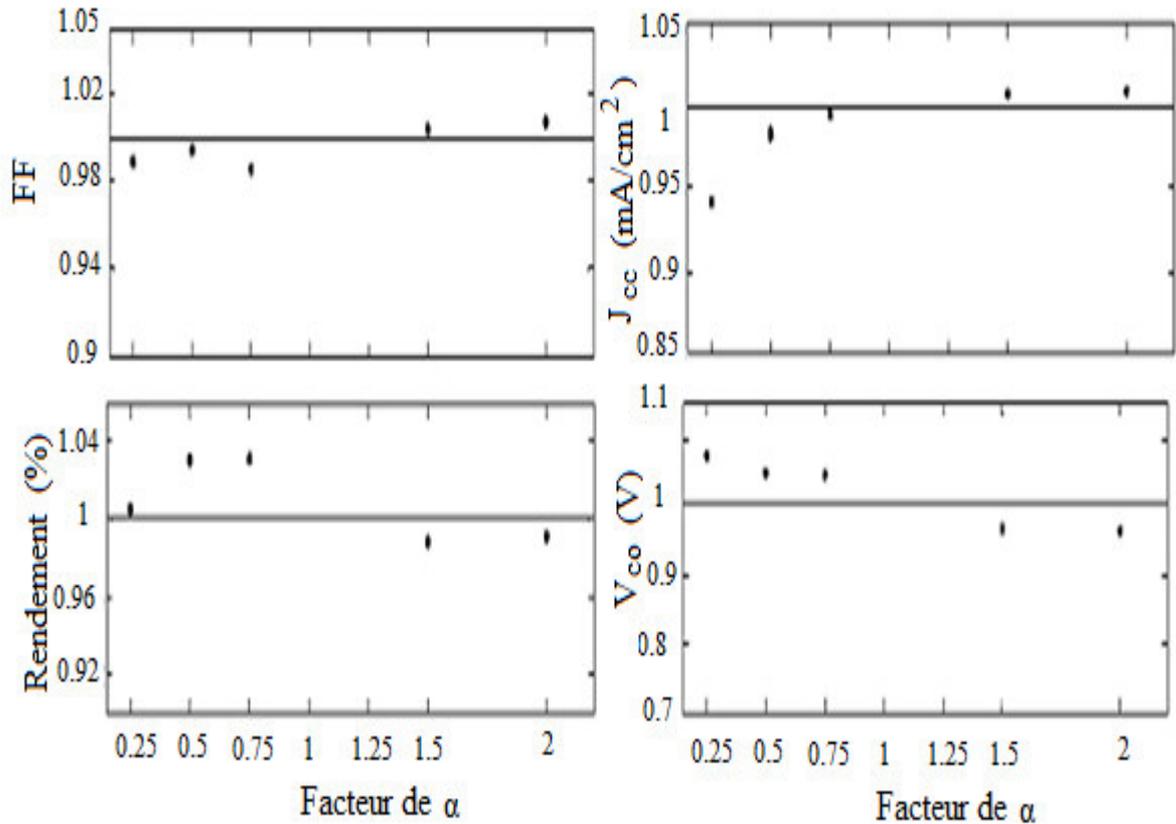


Figure (IV.6): Les performances normalisées en fonction de facteur de forme α [15].

Les résultats simulés montrent que le J_{cc} et le FF normalisés sont inférieurs à "1" pour un facteur de forme α inférieur à "1", alors qu'ils présentent des valeurs près de "1" pour α supérieur à "1". L'amélioration du J_{cc} peut être attribuée à l'amélioration de l'absorption à cause du gap réduit au-delà de la ZCE et au milieu de l'absorbeur (réduction du gap dans ces régions avec l'augmentation de α). Cependant, le V_{co} diminue avec l'accroissement de α , en raison de l'augmentation du taux de recombinaison dans l'absorbeur causée par la largeur de bande interdite réduite à la surface arrière. Bien que l'augmentation du J_{cc} avec l'augmentation de α , la diminution du V_{co} conduit à une réduction notable du rendement de conversion. Pour un profil proche du linéaire le rendement de conversion comparant au cas de base varie entre + 0,5% et - 0,2%. Ici, plus et moins indiquent la différence d'augmentation et de diminution, respectivement, du rendement de la cellule par rapport au cas référentiel.

IV.2. Profil de Fermi

La figure (IV.7) représente les cellules solaires à base de CIGS ayant un gradient de gap à profil de Fermi selon l'équation (IV.2).

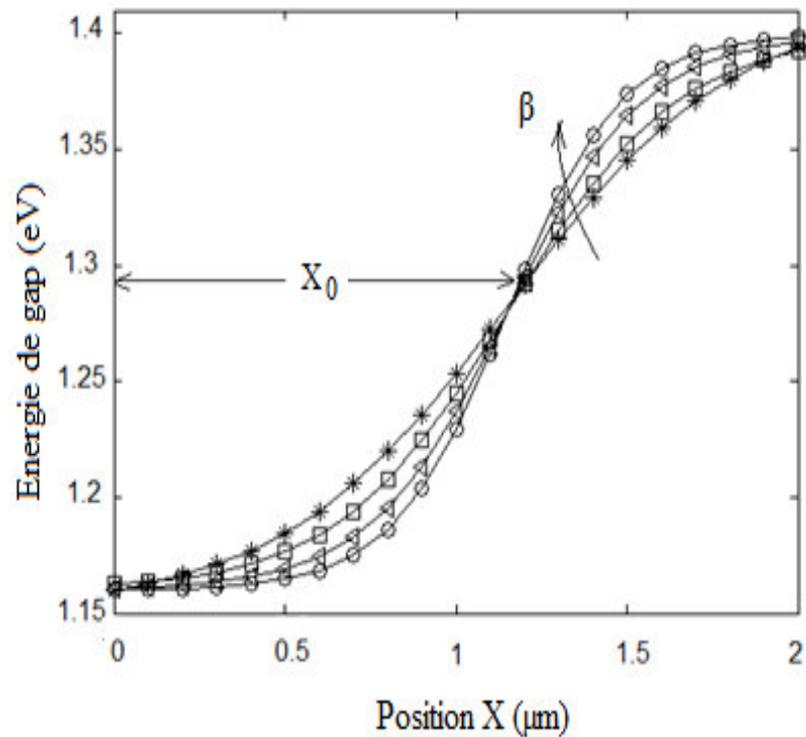


Figure (IV.7) : Schéma illustrant les différents profils de gap en fonction de β dans l'absorbeur CIGS.

Le profil de Fermi a un gap faible dans la région au-delà de la ZCE jusqu'au milieu de l'absorbeur et un fort gap au contact arrière, ce qui améliore d'un côté, l'absorption des grandes longueurs d'onde, et minimise d'un autre côté, la recombinaison à la surface arrière. Deux paramètres influencent le profil de Fermi : β et X_0 (voir figure (IV.7)).

IV.2.1. Influence de β

Afin d'étudier l'influence de la forme du profil, β , sur les performances de la cellule, nous avons fixé E_{gfront} et E_{gback} à 1.16 et 1.4 eV, respectivement et X_0 au milieu de l'absorbeur ($X_0 = E/2$). Les résultats obtenus sont présentés sur la figure (IV.9). Nous remarquons que l'influence de β est significative où tous les paramètres électriques montrent une augmentation quand le β augmente de 0,003 à 0,006, sauf le FF qui reste presque constant. L'augmentation de β améliore le V_{co} et le J_{cc} de la cellule, due respectivement à la présence d'un gap fort à la surface arrière qui permet d'atténuer le taux de recombinaison et à l'augmentation de l'absorption des grandes longueurs d'ondes, ce qui mène à une amélioration du rendement de la cellule solaire.

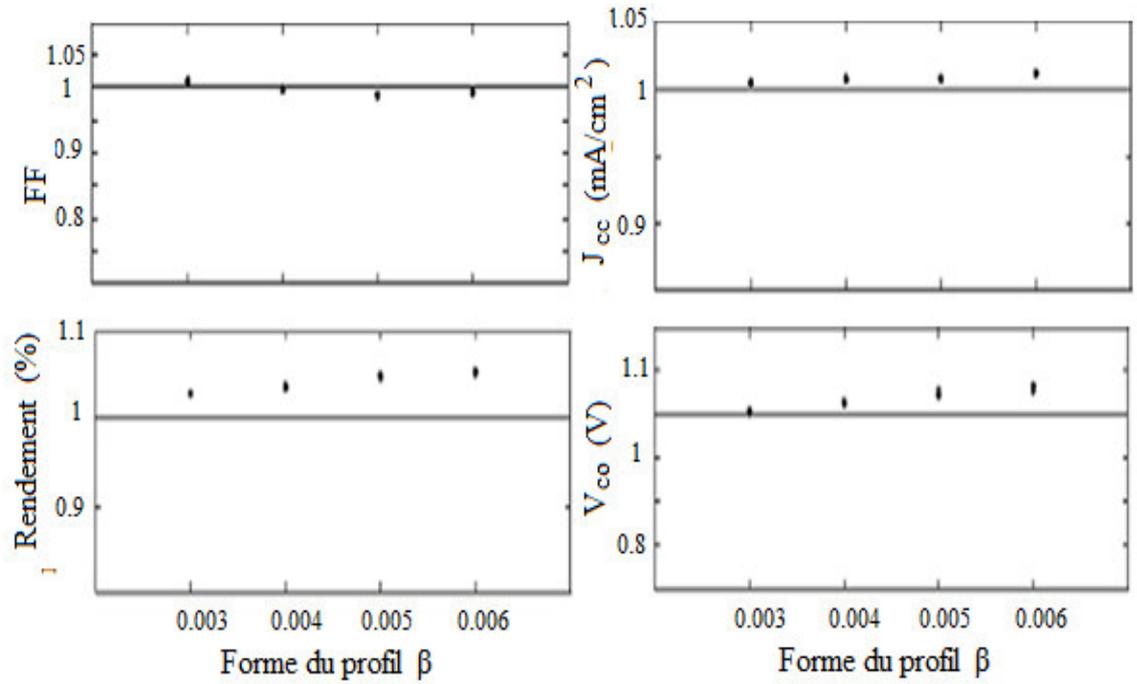


Figure (IV.8): Les performances normalisées en fonction de la forme de profil β [15].

IV.2.2. Point d'inflexion X_0

Le point d'inflexion X_0 peut être varié, en gardant β fixe égal à 0,003, afin d'estimer son effet sur les performances de la cellule. Sur les figures (IV.9 (a) et (b)) nous avons rapporté la variation des paramètres de la cellule en fonction de X_0 .

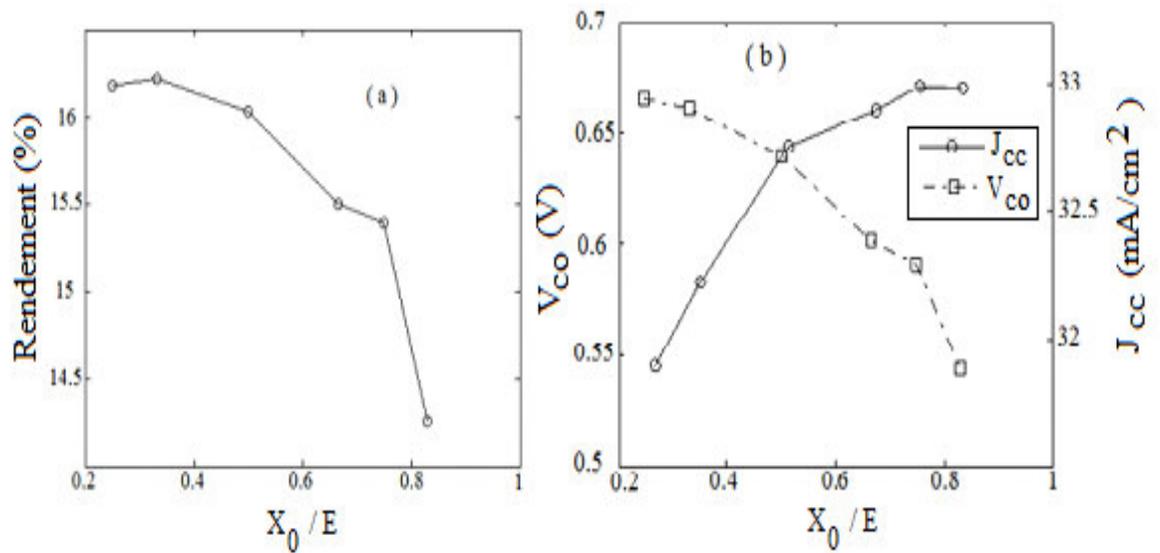


Figure (IV.9) : Le rendement (a), la tension du circuit ouvert (V_{co}) et le courant de court-circuit (J_{cc}), (b) en dépendance du point d'inflexion X_0 [15].

L'influence de X_0 sur les performances de la cellule est significative où nous remarquons que l'augmentation du J_{cc} avec l'augmentation de X_0 est accompagnée d'une réduction du V_{co} , ce qui cause une réduction considérable du rendement de conversion. Ce dernier diminue de 16% à 14% en raison de la diminution du gap au milieu de l'absorbeur et à la région adjacente au contact arrière avec l'augmentation de X_0 et qui augmente par conséquent, la recombinaison au volume et au contact arrière de la cellule. La position optimale de X_0 est autour du milieu entre 20-40% de l'épaisseur de l'absorbeur. En outre, nous notons une différence entre les rendements du profil de Fermi et le profil linéaire qui varie de +1% à - 0,9%, en faisant varier X_0 .

V. Comparaison

Afin de valider notre étude, une comparaison des résultats obtenus par la simulation avec d'autres expérimentaux a été faite. Pour cela, les profils expérimentaux et les profils approximatifs sont tracés sur la figure (IV.10 (a) et (b)) des deux cas étudiés. Le premier cas, est un gap graduel normal et le second cas, est un double gap graduel. Les profils expérimentaux sont tirés des références [16] et [17] pour le premier cas et le deuxième cas, respectivement. Pour adapter les profils expérimentaux, les paramètres β et X_0 ont été modifiés. Un bon ajustement a été obtenu avec $X_0 = 0,643 E$, $\beta = 0,003$ pour le premier cas, et avec $X_0 = 0,714 E_{\text{front}}$, $\beta = 0,068$ pour un gradient de gap frontal (front grading) et avec $X_0 = 0,767 E_{\text{back}}$ et $\beta = 0,006$ pour un gradient de gap face arrière (back grading) concernant le deuxième cas.

Les résultats de comparaison de η , FF, V_{co} et J_{cc} , pour les deux cas étudiés, sont donnés également dans le tableau (IV.2). Dans le premier cas, la déviation du gap prend la forme d'un profil de Fermi avec une valeur élevée de X_0 (0,643 E) et une faible valeur de β (0,003) ce qui conduit à une chute de rendement d'environ 0,6% par rapport au profil linéaire. En revanche, dans le deuxième cas, le double gradient de gap atténue l'influence de cette variation où la différence ne dépasse pas 0,2%.

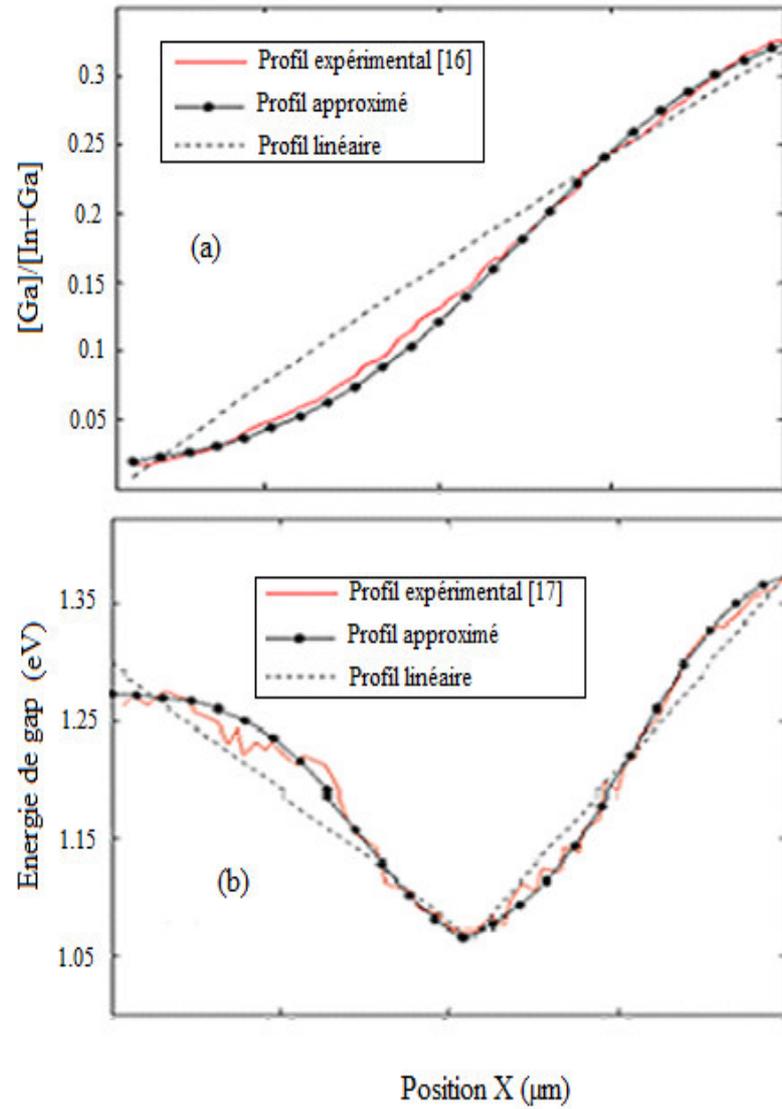


Figure (IV.10): La comparaison entre les différents profils des deux cas étudiés [15].

	Profil	J_{cc} (mA/cm ²)	V_{co} (V)	FF	η (%)
Cas 1	Profil linéaire	31,484	0,566	72,9	12,99
	Profil expérimental [16]	31,88	0,543	70,93	12,42
	Profil approximé	31,541	0,549	72,6	12,56
Cas 2	Profil linéaire	27,75	0,663	73,4	13,494
	Profil expérimental [17]	-	0,653	-	13,3
	Profil approximé	27,724	0,652	74	13,392

Tableau (IV.2): Comparaison entre les caractéristiques simulées et expérimentales de la cellule CIGS des cas 1 et 2.

VI. Conclusion

La variation des paramètres électriques η , FF, V_{co} et J_{cc} d'une cellule solaire si une mauvaise linéarité est produite dans un gradient de gap à profil linéaire, durant le processus de dépôt des éléments du CIGS, est étudiée. Deux types de profils sont simulés : le profil proche du linéaire et le profil de Fermi.

Nous avons constaté que les performances de la cellule solaire (CIGS) sont fortement affectées par la forme du profil du gap produit. La variation qui suit le profil de Fermi dans l'absorbeur a plus d'impact sur les performances par rapport au profil proche du linéaire, où la différence du rendement, en le comparant au profil linéaire, varie entre +1% et - 0,9 %. Par contre, le profil proche du linéaire varie entre 0,5 et -0,2 %. Selon les résultats de simulation, l'augmentation de β améliore les paramètres de la cellule, mais son effet n'est pas assez critique que celui du point d'inflexion X_0 qui conduit à une dégradation notable des performances de la cellule.

Références chapitre IV

- [1] S. H. Song, K. Nagaich, E. S. Aydil, R. Feist, R. Haley and S. A. Campbell. « Structure optimization for a high Efficiency CIGS solar cell », Conference Record of the IEEE Photovoltaic Specialists Conference, 2010, pp. 2488.
- [2] M. Gloeckler and J. R. Sites, « Bang-gap Grading in Cu(In,Ga)Se₂ solar cells », Journal Physics Chem Solids, Vol. 66, 2005, pp. 1891.
- [3] O. Lundberg, M. Edoff and L. Stolt, « The effect of Ga-grading in CIGS thin film solar cells », Thin Solid Films, Vol. 480-481, 2005, pp. 520.
- [4] S.Y. Kuo, M.Y. Hsieh, D.H. Hsieh, H.C. Kuo, C.H. Chen and F. Lai, « Device Modeling of the Performance of Cu(In,Ga)Se₂ Solar Cells with V-Shaped Bandgap Profiles », Hindawi Publishing Corporation International Journal of Photoenergy, 2014, pp. 1- 6.
- [5] K. Decock, J. Lauwaert and M. Burgelman, « Characterization of graded CIGS solar cells », Energy Procedia, Vol.2, 2010, pp. 49-54.
- [6] K. Decock, S. Khelifi and M. Burgelman. « Analytical versus numerical analysis of back grading in CIGS solar cells », Solar Energy materials and solar cell, Vol. 95, 2011, pp. 1550-1554.
- [7] A. Morales-Acevedo, « Variable band-gap semiconductor as the basis of new solar cells », Solar Energy, Vol. 83, 2009, pp. 66.
- [8] S. Ouédraogo, F. Zougmore, and J. M. Ndjaka, « Numerical Analysis of Copper-Indium-Gallium-Diselenide-based solar cells by SCAPS-1 », International Journal of Photoenergy, 2013, pp.1-9.
- [9] K. Decock, Samira. Khelifi, M. Burgelman, « Analytical versus numerical analysis of back grading in CIGS solar cells », Solar Energy Materials and Solar Cells, Vol. 95, 2011, pp. 1550.
- [10] O. Madulung, « Semiconductors-data handbook », Springer, 2004.
- [11] G. Hanna, A. Jasenek, U. Rau and H.W. Schock, « Influence of the Ga-content on the bulk defect densities of Cu(In,Ga)Se₂ », Thin Solid Film, Vol. 387, 2001, pp. 71.

- [12] N. Touafek, R. Mahamdi, M.S. Aida and A. Bouloufa, « Influence of band gap profiling in front part of absorber on CIGS solar cell performance », the fifth International Renewable Energy Congress IREC-2014, Hammamet, Tunisie, 25-27 Mars, 2014.
http://ieeexplore.ieee.org/xpl/login.jsp?tp=&arnumber=6826966&url=http://ieeexplore.ieee.org/xpls/abs_all.jsp?arnumber=6826966.
- [13] M. Gloeckler and J. R. Sites. « Band-gap grading in Cu (In,Ga)Se₂ solar cells », Elsevier Science, 2005.
- [14] T. Walter, R. Menner, M. Ruckh, L. Kaser and H.W. Schock, « Parameter studies and analysis of high efficiency Cu (In,Ga)Se₂ based solar cells », In: Proc 22nd IEEE PVSC Conference, 1991, pp. 924.
- [15] N. Touafek and R. Mahamdi, « Influence of band gap profiling on the performance of CIGS based solar cells », The Second International Conference on Electrical Engineering and Control Applications ICEECA'14, Constantine, Algeria, 18-20 Novembre, 2014, p. 55.
- [16] T. Dullweber, G. Hanna, W. Shams-Kolahi, A. Schwartzlander, M. A. Contreras, R. Noufi and H. W. Schock, « Study of the effect of Gallium grading in Cu(In,Ga)Se₂ », Thin Solid Films, Vol. 361-362, 2000, pp. 478.
- [17] D. Kuciauskas, V. Li. Jian, M. A. Contreras, J. Pankow, P. Dippo, M. Young, L. M. Mansfield, R. Noufi and D. Levi, « Charge carrier dynamics and recombination in graded band gap CuIn_{1-x}Ga_xSe₂ polycrystalline thin-film photovoltaic solar cell absorbers », Journal Applied Physics, Vol. 114, 2013, 154505.

Chapitre V :

*Influence des interfaces CdS/CIGS et CIGS/Mo
sur les performances de la cellule*

I. Introduction

Les cellules solaires à couche minces sont constituées de plusieurs couches de différents semi-conducteurs et de métaux. Donc, le dispositif dispose d'un grand nombre d'interface où des inter-diffusions d'atomes entre les différents matériaux sont possibles [1, 2]. Chaque matériau composant la cellule possède certaines propriétés physiques et chimiques, et chaque couche affecte les performances de la cellule d'une manière ou d'une autre. Les couches de ces dispositifs peuvent provoquer des contraintes, des défauts, des états d'interface, et des centres de recombinaison de surface, puisque chaque couche a une structure cristalline différente. Par ailleurs, les propriétés d'interface peuvent subir une modification, au cours du traitement telle que la suite du processus de croissance impliquant le dépôt séquentiel de couches multiples à des conditions de dépôt différentes. En outre, les conditions de recuit [3] et les traitements post-dépôt, qui nécessitent de hautes températures, peuvent modifier les propriétés des interfaces, qui peuvent, à leur tour, entraîner des défauts d'interface qui provoquent des recombinaisons des porteurs indésirables. En conséquence, les paramètres de la cellule tels que la tension du circuit-ouvert, la densité de courant de court-circuit, le facteur de forme et le rendement de conversion peuvent être modifiés significativement.

II. Interface CdS/CIGS

Dans la plupart des dispositifs à hétérojonction, les propriétés de l'interface p-n affectent, de manière significative, la performance des cellules solaires. Dans le matériau CIGS des études de l'XPS montrent la présence d'une très fine couche riche en In (CuIn_3Se_5) de type converti (type n) à la surface du matériau CIGS [4] et qui possède un gap plus large que le CIGS ce qui contribue à l'amélioration des performances de la cellule [5, 6]. Cette couche est identifiée comme étant une couche de défauts de surface (SDL), de structure similaire au CIGS au volume [5, 7].

II.1. Modèles de la couche de surface du CIGS

Pour expliquer l'origine de cette inversion de la surface du CIGS, différents modèles ont été proposés. Ces modèles peuvent être divisés en deux groupes principaux :

II.1.1. Surface du CIGS auto-inversée

Elle comporte trois modèles :

- *Modèle de composé de défauts ordonnés (ODC: Ordered Defects Compound)*

Pour ce modèle, il a été observé expérimentalement que la composition de la surface des couches du Cu(In,Ga)Se₂ dévie de celle du volume [4, 5, 8, 9], en raison de l'auto-reconstruction du matériau pour être énergétiquement plus stable [10].

Schmidt et al. [4] ont observé, pour les couches riches en Cu ($In/(In+Cu) < 0,5$), une ségrégation du Cu_xSe sur la surface des films CIGS. En revanche, une composition légèrement riche en Indium ($In / (In + Cu) > 0,52$) conduit à une formation d'une surface de CuIn₃Se₅. Dans ce cas, la distance entre le niveau de Fermi (E_F) et la bande de valence à la surface du CIS est très grande, ce qui suggère une couche de surface de type n avec une bande interdite plus grande ($E_{g2} = 1,4$ eV) [11] que celle du CIS au volume ($E_{g1} = 1,04$ eV), comme montre le diagramme de bande des couches CIS sur la figure (V.1).

Cette inversion crée une jonction p-n dans la couche CIS et décale la jonction p-n loin de l'interface CdS / CIS. En outre, la possibilité de former l'ODC permet de créer une large barrière de trous $\Phi_b^p = E_F - E_v$, en raison de la différence d'énergie entre les bandes de valence ΔE_v [12].

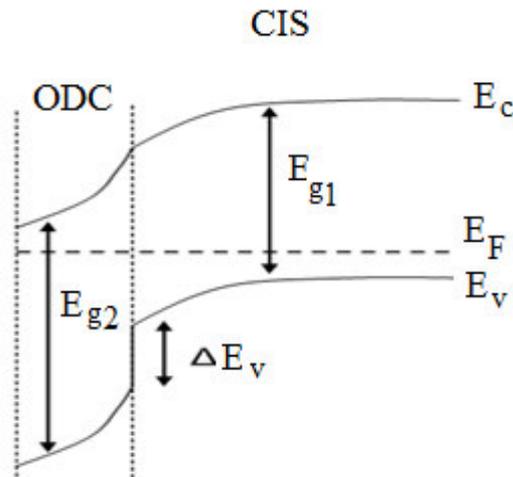


Figure (V.1) : Le diagramme de bande proposé pour les couches minces CuInSe₂

- *Modèle de Cahen-Noufi*

Contrairement au premier modèle (ODC), Cahen et Noufi [13] ont suggéré que la présence des postes vacants du S_e (V_{Se}) sur la surface du CIGS joue un rôle important dans l'inversion du type de la surface du CIGS. En raison d'une insuffisance de S_e, l'In sur la surface cède ses électrons, à partir de son niveau atomique, à la bande de conduction la plus extérieure de la couche CIGS. En conséquence, l'Indium devient un état donateur chargé positivement, et la bande de conduction se penche fortement vers le niveau de Fermi (Figure V.2 (a)), ce qui signifie que la

surface est de type inversé. Lorsque la couche du CIGS est exposée à l'air, l'oxygène peut obtenir les électrons de la bande de conduction, et devient O^{-2} avant de se lier aux postes vacants du Sélénium. En conséquence, les états de surface sont passivés et la courbure de la bande de conduction est réduite (Figure V.2 (b)). Lors du dépôt du CdS par la méthode de dépôt par un bain chimique (CBD), une dissolution des oxydes de la surface du CIGS est observée et par conséquent, les postes vacants du Vse ainsi que la largeur de la courbure de la bande de conduction sont restaurés. Pour des dispositifs basés sur une hétérojonction ZnO/CdS/CIGS, les auteurs [14,15] affirment qu'une densité des états d'interface de l'ordre de $10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ est suffisante pour pincer le niveau de Fermi E_F à l'interface CdS/CIGS.

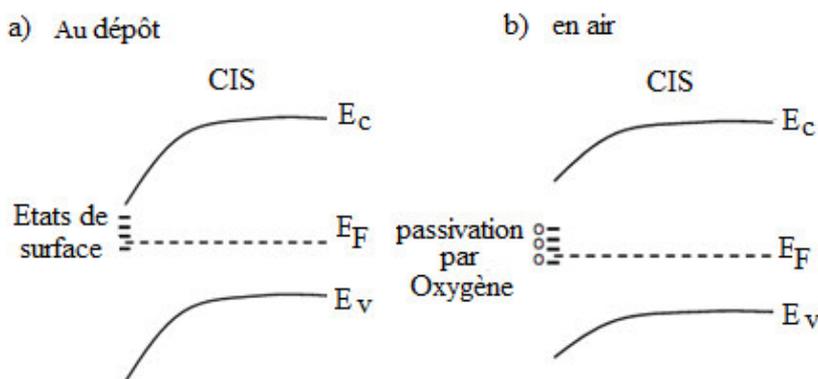


Figure (V.2) : a) Une large concentration des états d'interface provoque une large courbure de bande dans les couches du CuInSe_2 . b) Une exposition de ces couches en air passive les états de surface en réduisant ainsi, la courbure de bande.

- *Modèle de défauts de la couche de surface (SDL: Defect Surface Layer)*

Le modèle de défauts de la couche de surface (SDL) proposé par Herberholz et al. [16] est un compromis entre les deux modèles auparavant décrits. Dans ce modèle, l'inversion de type n'est pas due à une ségrégation de surface de la β -phase mais à un champ causé par les états donateurs, chargés positivement, à la surface de la CIS qui peut pousser les ions Cu^+ à migrer plus profondément dans la couche du CIS. En conséquence, une couche de défaut de surface avec une forte concentration de défauts chargés négativement est formée (Figure V.3). Jaffe et Zunger [17] ont trouvé que la bande interdite de cette couche de défauts de surface est plus grande que celle du matériau au volume, et que la bande de valence vers la surface s'est élargie, ce qui empêche la recombinaison à l'interface.

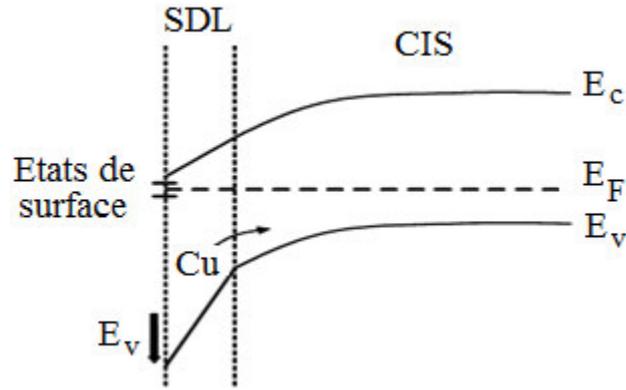


Figure (V.3) : La bande interdite de la couche de défauts de surface (SDL) est plus grande que celle du volume.

II.1.2. Mélange du CdS et CIGS à l'interface

L'interface CdS / CIGS n'est pas brutale mais graduée avec un mélange des éléments du CdS et du CIGS. Heske et al. ont trouvé du Se dans les couches du CdS et ils ont interprété les résultats par la diffusion du Se du CIGS dans la couche du CdS [18]. La diffusion du Cd par un bain chimique dans la couche de l'absorbeur CIGS a été rapportée par plusieurs auteurs [1, 19, 20]. La profondeur de la diffusion Cd causé par le dépôt chimique du CdS est rapportée différemment. Wada a observé la diffusion du Cd jusqu'à 50-100 nm en profondeur, dans la couche absorbante [21]. Quant à Nakada, il a rapporté la présence du Cd à 10 nm de la surface de la couche du CIGS [1,20]. Pour leur part, Liao et al. ont trouvé une grande concentration d'atomes du Cd, 1-3 couches atomiques à la surface du CIGS [2].

En parallèle avec les observations de la diffusion du Cd, une diminution de la teneur en Cu dans la couche de la surface comparée à celle du volume est observée [19, 21]. Depuis, des rayons ioniques d'ions Cd^{2+} (0,97 Å) et Cu^+ (0,96 Å) sont très proches. Il est probable que les postes vacants du Cu seront substitués par les atomes du Cd diffusés.

La présence de cette couche, riche en In de type n, à l'interface CdS/CIGS forme donc, une jonction p-n entre p-CIGS et n-SDL [22] et la jonction p-n dans les cellules CIGS est une homojonction située dans la couche absorbante du CIGS [23]. Dans ce contexte, Ramanathan [24] a suggéré que la diffusion du Cd qui résulte en une région de surface de type n peut jouer un rôle important dans la formation de l'homojonction dans la couche d'absorbeur CIGS. Donc, à la jonction CdS/CIGS nous trouvons deux interfaces importantes: SDL/CIGS (homojonction) et CdS/SDL (hétérojonction).

De ce fait, notre but est d'examiner, à l'aide d'un logiciel de simulation SCAPS-1D, l'influence de l'excès de défauts au niveau des interfaces SDL / CIGS et CdS/SDL, ainsi que l'effet de la bande interdite de la couche formée (SDL) sur les paramètres de la cellule solaire CIGS.

Dans cette étude, deux modèles ont été considérés: le modèle de dopage (doping model), dans lequel la couche de surface est un matériau dopé de type n, et le modèle de pincement (pinning model), qui considère la couche de surface comme étant une couche de type inversé (n), en raison du pincement du niveau de Fermi par les défauts donneurs à l'interface avec le CdS. Le pincement du niveau de Fermi est modélisé par une forte densité, $3 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, de défauts donneurs très proches de la bande de conduction de la CIGS ($E_F = 0,2 \text{ eV}$). Sachant qu'une petite section de capture (capture cross sections) de 10^{-18} cm^2 est choisie pour différencier le modèle de pincement et la recombinaison due aux défauts.

II.2. Influence des défauts excédentaires à l'interface CdS/SDL

La fonction principale de la couche CdS est de former l'hétérojonction avec la couche CIGS d'une part et de protéger la couche SDL d'autre part. Ceci dit, la méthode de dépôt doit être bien choisie afin de minimiser les défauts d'interface. Dans le cas idéal sans les états d'interface, la charge positive dans la partie de la jonction ZnO/CdS est équilibrée par la charge négative dans la ZCE

$$Q_n + qd_w N_w + qd_b N_b = qN_a W_a \quad (V.1)$$

Où :

Q_n : la charge par unité de surface dans la couche dépeuplée du ZnO dopé.

q : la charge élémentaire.

N_w , N_b et N_a : le dopage dans i-ZnO, CdS et CIGS, respectivement avec des épaisseurs d_w , d_b et W_a qui représente la largeur de la ZCE dans la couche CIGS.

A partir de l'équation (V.1), on peut voir que l'introduction des états de charges négatives à l'interface CdS/CIGS (le côté gauche de l'équation (V.1)) réduit la largeur W_a de la ZCE dans la couche absorbante. Par conséquent, la barrière de trous à l'interface diminue, ce qui augmente la vitesse de recombinaison à l'interface CdS/CIGS. Ceci explique l'importance de l'étude de l'influence de l'excès de défauts à l'interface CdS/CIGS sur les paramètres de la cellule solaire.

Pour voir la variation des paramètres électriques de la cellule en fonction de la concentration de défauts nous fixons cette dernière au niveau de l'interface SDL/CIGS à une valeur

minimale 10^9 cm^{-2} pour minimiser son effet et nous varions celle de l'interface CdS/SDL entre 10^9 - 10^{12} cm^{-2} .

La figure (V.4) montre la dépendance des paramètres du: V_{co} , J_{cc} , FF et le rendement de conversion en fonction de la concentration de défauts à l'interface CdS/SDL pour des valeurs de $\sigma_{n/p}$ (section de capture efficace des électrons et des trous), respectivement $\sigma_n = \sigma_p = 10^{-15}$, 10^{-14} et 10^{-13} cm^2 . Les résultats, des modèles étudiés, illustrés sur cette figure révèlent que le modèle de pincement (lignes noires) donne les meilleures performances par rapport au modèle de dopage (lignes rouges).

En outre, nous avons observé, à l'exception du V_{co} , que les paramètres de la cellule diminuent avec l'augmentation des défauts dans la gamme de 10^{10} à 10^{12} cm^{-2} en particulier, pour le modèle de pincement qui révèle une grande sensibilité aux variations de la concentration de défauts en augmentant la section de capture efficace $\sigma_{n/p}$ où nous avons noté une diminution du rendement d'environ 1,2 %, en passant de $\sigma_{n/p} = 10^{-15}$ à 10^{-13} , contrairement au modèle de dopage où la chute ne dépasse pas 0,2%.

L'influence de la concentration de défauts sur les paramètres électriques de la cellule pour le modèle de dopage reste presque insignifiante pour des défauts entre 10^9 et 10^{11} cm^{-2} . Mais, au delà de 10^{11} cm^{-2} , le courant de court-circuit, le facteur de forme et le rendement de conversion diminuent exponentiellement avec l'augmentation de défauts.

Nous constatons aussi que pour le modèle de dopage, la concentration de défauts est plus décisive que la section de capture efficace. Cependant, pour le modèle de pincement, les performances sont fortement influencées beaucoup plus par la variation du par $\sigma_{n/p}$ que par la variation de la concentration de défauts. L'effet de $\sigma_{n/p}$ est mieux remarqué pour une concentration de défauts élevée, où le rendement subit une réduction de 0,8 à 1,1% en variant $\sigma_{n/p}$ de 10^{-15} à 10^{-13} .

II.3. Influence des défauts excédentaires à l'interface SDL/CIGS

Les défauts excédentaires situés à l'interface SDL/CIGS sont aussi importants à cause d'une possible recombinaison des porteurs avec les pièges de cette interface. La figure (V.5) montre le rôle, à la fois, de la concentration de défauts et de la section efficace dans la détermination des paramètres électriques de la cellule solaire pour les deux modèles étudiés : modèle de dopage

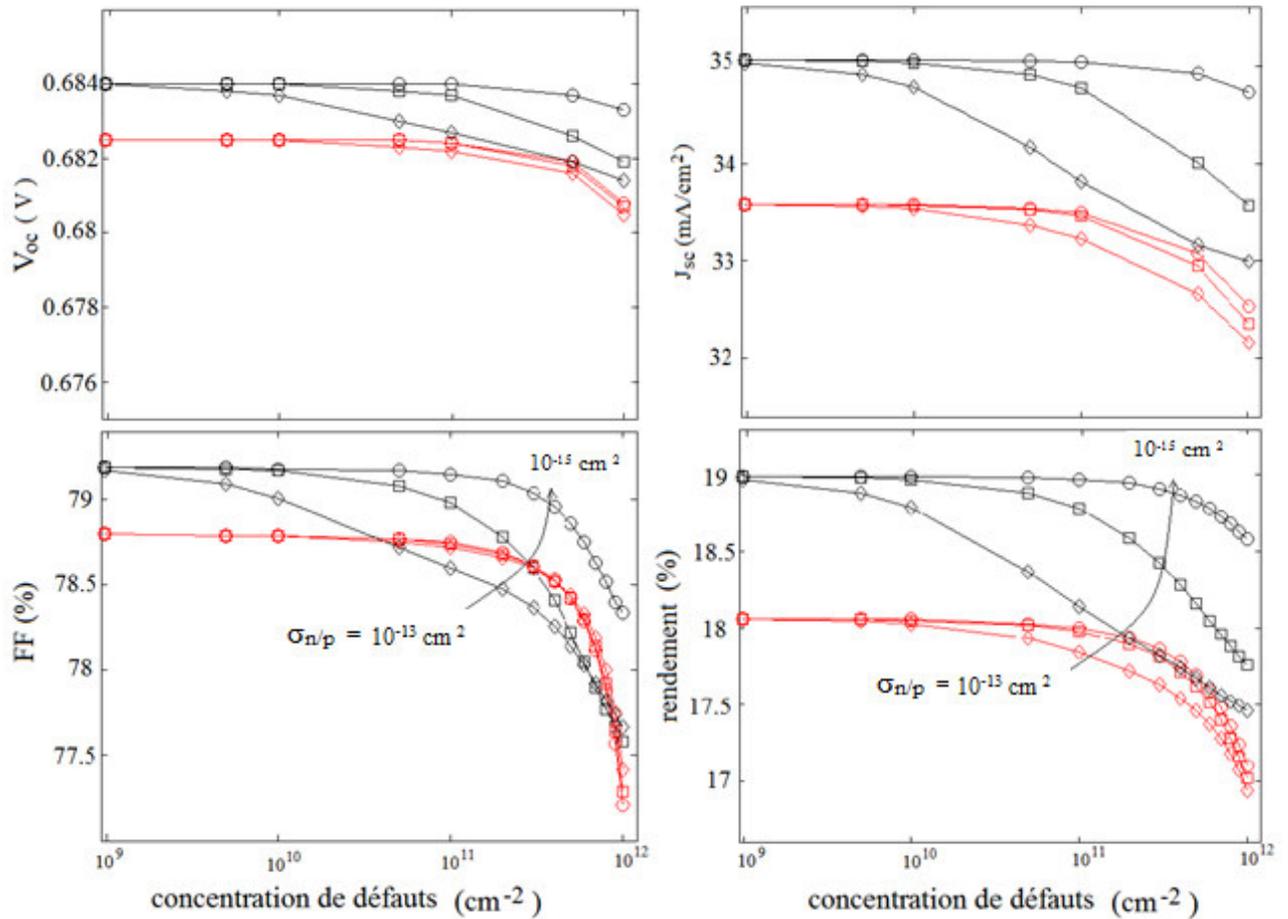


Figure (V.4) : Les paramètres électriques de la cellule en fonction de la concentration de défauts, modèle de pincement (lignes noires) et modèle de dopage (lignes rouges). Les sections de captures $\sigma_{n/p}$ des électrons et des trous sont choisis $\sigma_n = \sigma_p = 10^{-13}/10^{-14}/10^{-15} \text{ cm}^2$ (diamants, carrés, cercles) [25].

(les lignes rouges) et modèle de pincement (lignes bleues). Nous pouvons constater que l'excès de défauts à l'interface SDL/CIGS influence fortement l'ensemble des paramètres électriques : J_{cc} , V_{co} , FF, et rendement. Ces deniers diminuent avec l'augmentation de la concentration de défauts où l'effet de la section de capture efficace apparaît et devient significatif pour des concentrations de défauts au delà de 10^{10} cm^{-2} . Le modèle de pincement est plus sensible aux variations de $\sigma_{n/p}$ qui conduisent à une baisse du rendement entre 4 et 5 %. Par exemple, pour une concentration de défauts égale à 10^{12} cm^{-2} , le rendement diminue de 18,9 % à 14 % en passant de $\sigma_{n/p} = 10^{-15}$ à $\sigma_{n/p} = 10^{-13} \text{ cm}^2$, par rapport au modèle de dopage qui présente une diminution plus faible entre 3 et 3,5 %.

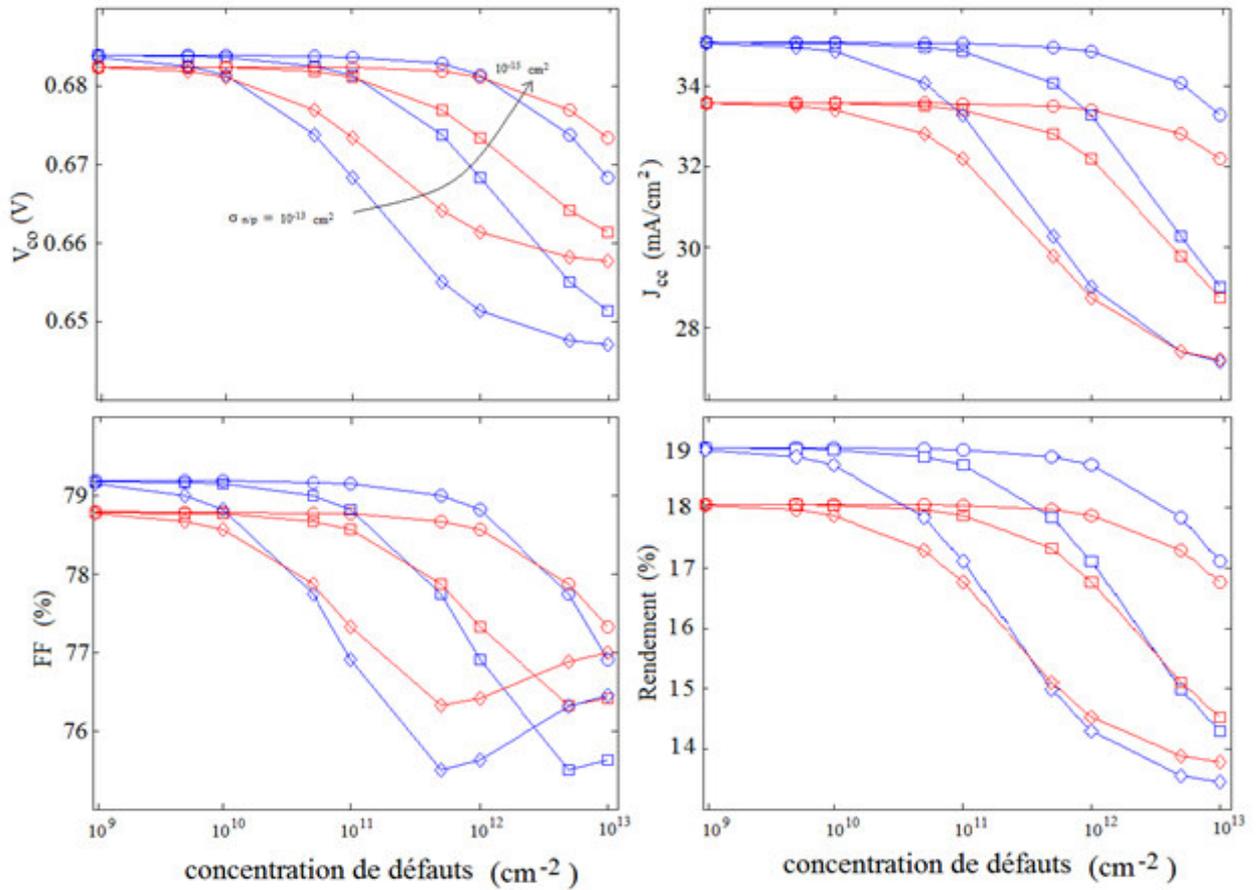


Figure (V.5) : Les paramètres électriques de la cellule en fonction de la concentration de défauts à l'interface SDL/CIGS. Modèle de pincement (lignes bleues) et modèle de dopage (lignes rouges). les $\sigma_{n/p}$ pour les électrons et les trous sont $10^{13}/10^{14}/10^{15}$ cm^{-2} (diamant, carré, cercle) [25].

II.4. Influence de l'élargissement de la bande interdite

Un rôle majeur dans la suppression de la recombinaison à l'interface est joué par la couche SDL qui se forme dans les chalcopyrites pauvre en Cuivre et conduit à un élargissement de la bande interdite dans le matériau [22]. Cette couche est attendue à jouer un rôle important dans l'amélioration des performances de la cellule basée sur le $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ [26, 27]. Donc, l'évaluation de son effet sur les performances de la cellule est importante. Les propriétés optiques de la couche SDL sont similaires à celles du CIGS [28]. Ainsi, seule l'affinité électronique est ajustée en fonction de la variation de la bande interdite dans la couche SDL, en gardant la bande de valence (valence band offset) entre la surface et le volume de la couche CIGS à 0,1 eV. Le $\sigma_{n/p}$ est fixé à 10^{13} cm^{-2} et la concentration de défauts dans les deux modèles varie dans la gamme de 10^9 - 10^{12} cm^{-2} . Quant à la bande interdite de la couche SDL, elle varie de 1,2 à 1,5 eV.

La figure (V.6) montre le rendement calculé en fonction de la concentration de défauts et de l'énergie de la bande interdite de la couche SDL. La figure (V.6 (a)) présente les résultats à l'interface SDL/CIGS et la figure (V.6 (b)) ceux de l'interface CdS/SDL ; le modèle de pincement (lignes noires) et le modèle de dopage (lignes bleues).

Pour les deux modèles, en augmentant les défauts au delà de 10^{11} cm⁻², l'effet de l'augmentation de la bande interdite de la couche SDL devient plus important. En effet, le rendement augmente presque de 3 % lorsque le gap du SDL passe de 1,2 à 1,5 eV car l'augmentation de la bande interdite de SDL réduit la bande de conduction à l'interface CdS/SDL, ce qui mène à une amélioration des performances de la cellule solaire.

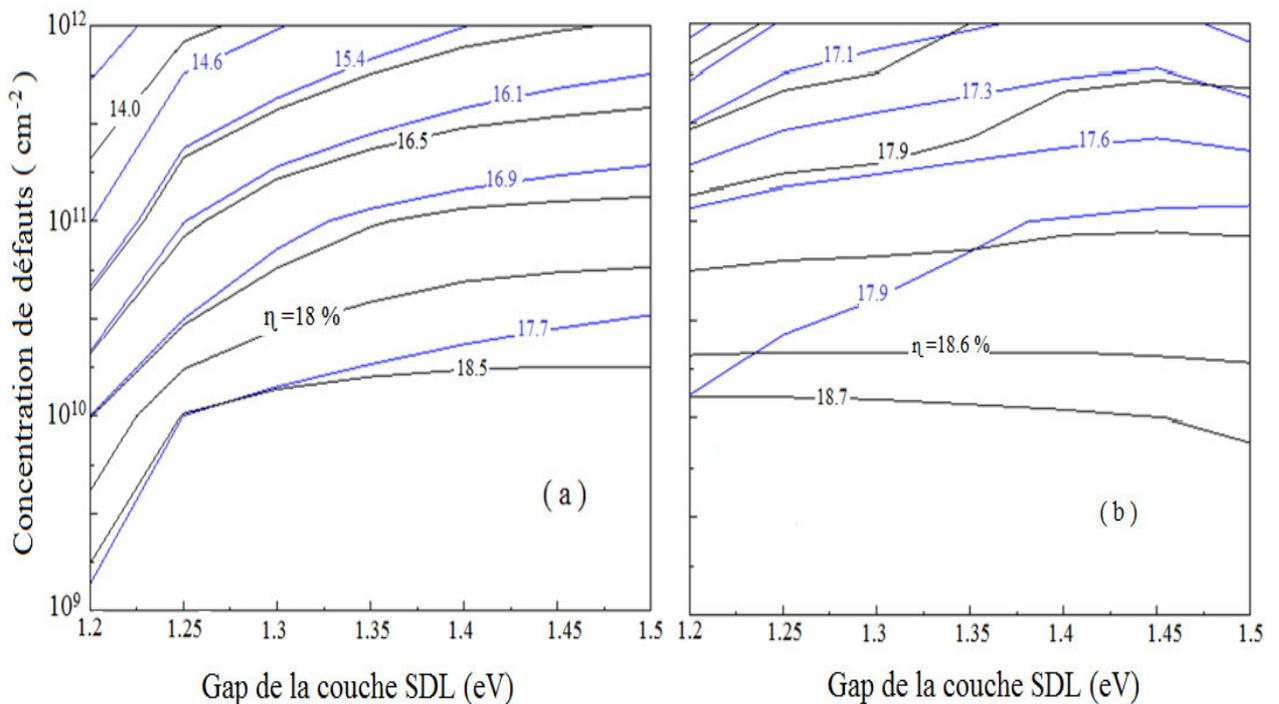


Figure (V.6): Le rendement de la cellule en fonction de la bande interdite et les défauts de la couche SDL, (a) à l'interface SDL/CIGS et (b) à l'interface CdS/SDL. Modèle de pincement (lignes noires) et modèle de dopage (lignes bleues) [25].

III. Interface CIGS/Mo

L'amincissement de la couche absorbeur sans altérer les performances de la cellule reste l'objectif principal de la recherche photovoltaïque [29,30]. La réduction de l'épaisseur de la couche du CIGS qui est une technologie prometteuse entrainera deux conséquences positives.

La première sera de réduire de façon significative la durée de dépôt de ces couches et donc, le cout de production. La deuxième sera de minimiser le taux d'utilisation de l'Indium, élément relativement rare et cher. Cela permettra d'accroître considérablement les capacités de production de la filière CIGS.

Par ailleurs, le coefficient d'absorption élevé (10^5 cm^{-1}) du CIGS [31] permet d'absorber plus de 90 % des photons incidents pour une épaisseur de 0,5 μm . Aujourd'hui, ce matériau présente une épaisseur typique de 1,5 à 2 μm [32]. Diverses recherches ont rapporté l'effet de l'épaisseur de la couche CIGS au dessous de 1 μm sur les performances de la cellule [33, 34]. En fait, les résultats montrent que plus l'épaisseur est réduite le rendement diminue. Dans les couches minces par rapport aux couches épaisses, le profil de génération de porteurs se déplace plus près du contact arrière où ce dernier (CIGS/Mo) et la zone de déplétion deviennent très proches les uns des autres ce qui augmente la probabilité de recombinaison des électrons au niveau du contact arrière. Ce phénomène influe énormément les paramètres électriques de la cellule.

Afin de produire des absorbeurs très minces sans pertes importantes dans les performances de la cellule, le risque de recombinaison des porteurs au contact arrière doit être atténué. Ce risque peut être minimisé par une passivation du contact arrière à travers:

- La construction d'un champ électrique dans le matériau de sorte que les porteurs seront repoussés loin de l'interface en gardant les photoélectrons générés loin de l'interface CIGS/Mo.
- La réduction de la surface de contact arrière en combinant une couche de passivation à la surface arrière avec des contacts ponctuels locaux nanométriques [35-37].

L'objectif de cette partie de travail est d'examiner l'influence de la vitesse de recombinaison à la surface arrière, ainsi que l'effet du champ électrique ajouté à la surface arrière dénommé réflecteur d'électrons face arrière ou EBR (Electron Back Reflector) sur les performances de la cellule CIGS lorsque l'épaisseur de la couche active est réduite.

III.1. Variation de la vitesse de recombinaison au contact arrière

Dans les couches extra minces, le contact arrière et la région de déplétion deviennent très proches l'un de l'autre ce qui augmente la probabilité de recombinaison des porteurs au contact arrière. Ceci explique l'importance d'étudier l'effet de la S_r sur les performances de la cellule en

variant l'épaisseur de l'absorbeur de 0,3 à 2 μm . La bande interdite de l'absorbeur est maintenue constante égale à 1,15 eV et cela pour éliminer les effets de passivation à la surface arrière provoqués par le champ électrique créée par un gradient de Gallium. La vitesse de recombinaison à l'interface CIGS/Mo dans cette partie varie entre 10^2 et 10^6 cm/s cette dernière présente la valeur typique de S_r à l'interface CIGS/Mo [38].

Dans la figure (V.7), nous avons présenté les résultats de simulation en termes de FF, J_{cc} , V_{co} , et η en fonction de S_r pour différentes épaisseurs de l'absorbeur.

Dans un premier temps, pour une vitesse de recombinaison (S_r) standard égale à 10^7 cm/s, tous les paramètres de la cellule sont réduits avec la diminution de l'épaisseur de la couche CIGS [34], qui est causée principalement par l'absorption de la lumière qui commence à être incomplète, dans les couches extra-minces, et par la forte recombinaison à l'interface CdS/ CIGS en raison de la réduction de la courbure de bande qui conduit à un décalage du niveau de Fermi vers le milieu du gap.

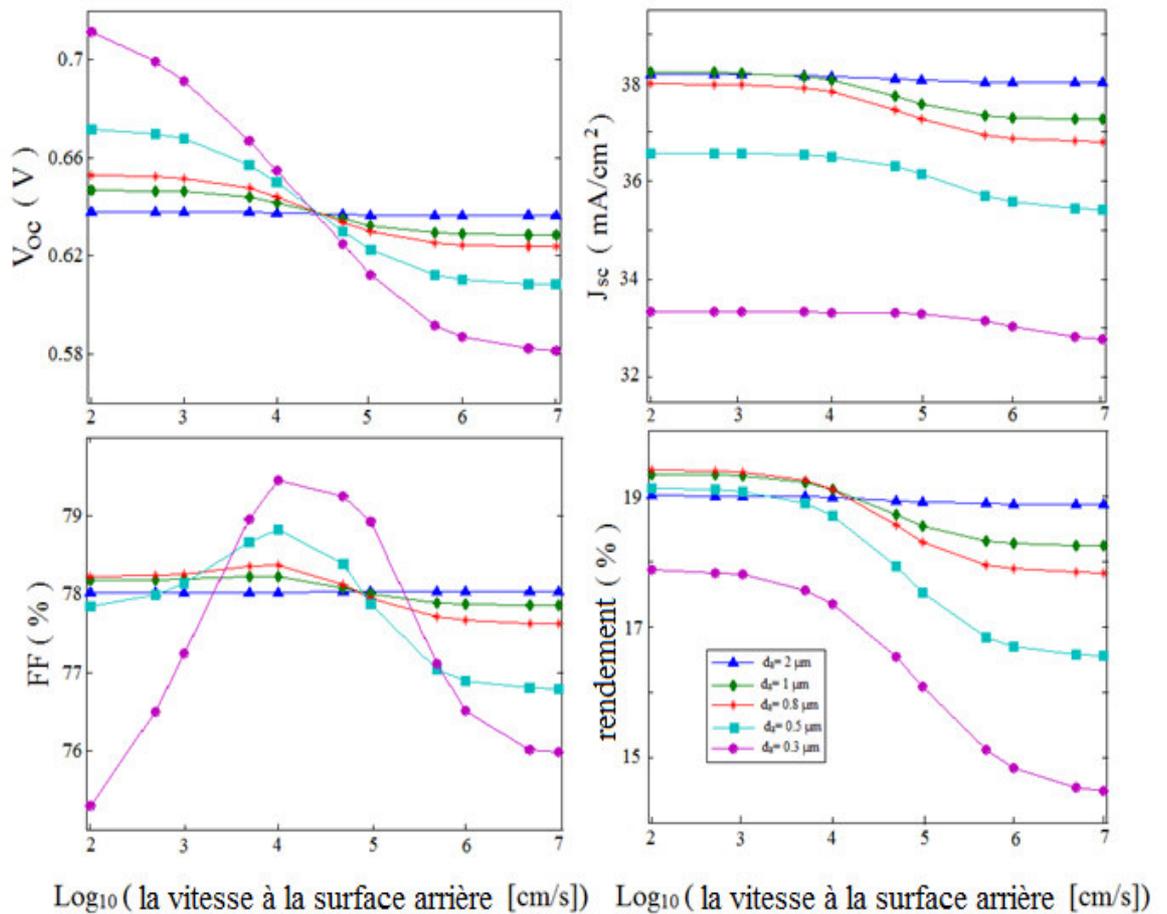


Figure (V.7): Les performances de la cellule en fonction de l'épaisseur de la couche absorbante et de la vitesse de la recombinaison à la surface arrière [39].

Dans un second temps, les absorbeurs extra-minces sont significativement affectés par la vitesse de recombinaison, S_r . Le rendement varie exponentiellement avec la diminution de S_r où le gain augmente d'environ de 1% à 3% dépendant de l'épaisseur mais, au dessous de S_r égale à 10^3 cm/s le rendement aplati et devient constant. Cependant, pour les absorbeurs à une épaisseur supérieure à $1\mu\text{m}$, la variation des paramètres de la cellule avec S_r est non significative pour tous les paramètres de la cellule puisque $1,5\mu\text{m}$ est suffisante pour absorber tous les photons incidents du spectre solaire [40]. Par contre, diminuer la S_r améliore la tension du circuit ouvert et le Facteur de Forme ce qui conduit à une augmentation du rendement de la cellule.

Le fait que le V_{co} et le FF sont fortement influencés par ce paramètre, S_r , pourrait s'expliquer par la réduction de la recombinaison dans la ZCE qui devient très proche de la surface arrière. Comme on peut attribuer par ailleurs, la chute du Facteur de Forme, pour les couches extra-minces au dessous d'une vitesse de recombinaison $S_r = 10^4$ cm/s, à l'augmentation de la résistance série.

Cependant, l'influence de S_r sur la densité du courant diminue en particulier, lorsque les épaisseurs de la couche deviennent inférieures à $0,5\mu\text{m}$, parce que la plupart des porteurs sont créés dans la zone de déplétion et ils seront collectés par le champ électrique de cette zone où nous notons seulement une augmentation de la densité de courant de 0,5 - 1% en variant l'épaisseur de $0,3$ à $1\mu\text{m}$. Lorsque l'épaisseur de l'absorbeur est réduite, l'effet de S_r au contact arrière devient important où on remarque que, pour des faibles vitesses de recombinaison et pour des épaisseurs inférieures à $1\mu\text{m}$, le rendement et le V_{co} , dépassent celui des couches épaisses.

III.2. Influence des paramètres caractéristiques d'EBR

Pour atténuer la recombinaison au contact arrière de l'absorbeur CIGS, une couche très mince avec une largeur de bande plus élevée que le reste de l'absorbeur est ajoutée à l'arrière de l'absorbeur. Cette couche, dénommée EBR, reflète les électrons et les éloigne du contact arrière. La différence entre la largeur des bandes dans la couche de l'EBR et le reste de l'absorbeur présente la hauteur de l'EBR. L'influence de la hauteur de l'EBR ainsi que son épaisseur notée W_{EBR} , ajouté à la surface arrière, sur les performances de la cellule seront présentées.

III.2.1. Hauteur de l'EBR

Nous étudions l'influence de la hauteur de l'EBR sur les performances de la cellule pour différentes épaisseurs. Pour cet objectif, la hauteur de l'EBR a été modifiée en faisant varier la

largeur de la bande interdite de la couche mince riche en Gallium dont l'épaisseur est fixée à 15 % du total de l'épaisseur de la couche absorbante. La figure (V.8) illustre le rôle de la hauteur de l'EBR ainsi que la vitesse de recombinaison à la surface arrière (S_r) à la détermination des paramètres électriques de la cellule pour différentes épaisseurs de l'absorbeur.

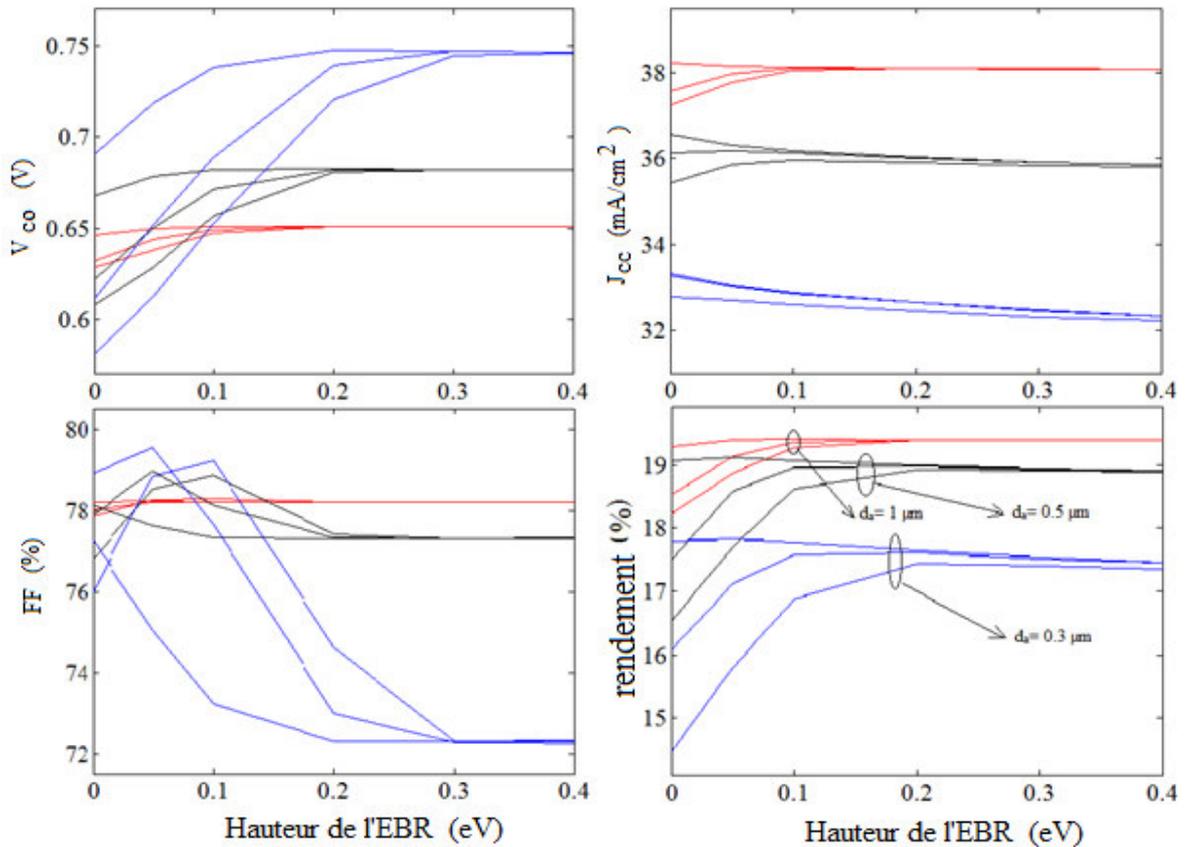


Figure (V.8): Les résultats de la simulation pour différentes épaisseurs $d_a=1\mu\text{m}$ (lignes rouges), $d_a=0.5\mu\text{m}$ (lignes noires), $d_a=0.3\mu\text{m}$ (lignes bleues). Du haut en bas, les différentes lignes correspondent à des valeurs de S_r : 10^3 ; 10^5 ; 10^7 cm/s [39].

Ceci dit, la hauteur de l'EBR influe énormément sur les paramètres (V_{co} , FF, et le rendement) en particulier, pour des vitesses de recombinaison élevées où la présence de l'EBR devient plus importante. En revanche, à des vitesses de recombinaison faible, l'EBR n'est pas bénéfique pour les couches extra-minces. Cela est du à la fois, à une augmentation de la largeur de la bande interdite dans la zone de charge d'espace qui mène à une augmentation du V_{co} et à une réduction de l'absorption dans l'absorbeur qui se manifeste sous forme d'une légère réduction du J_{sc} . L'effet de l'EBR sur le J_{cc} est faible parce que dans les absorbeurs extra-minces la majorité de l'absorbeur est dépeuplé. Par conséquent, les électrons générés près de la surface arrière seront collectés par le champ électrique existant dans l'absorbeur.

La hauteur de l'EBR réduit l'effet de la S_r en particulier, les absorbeurs extra-minces. Le V_{co} et le rendement ont la même tendance de variation avec l'augmentation de la hauteur de l'EBR. Nous notons également une légère diminution du rendement des couches inférieures à $1 \mu\text{m}$ pour des vitesses de recombinaison aussi faibles en augmentant la hauteur de l'EBR et celle-ci est due à la diminution de l'absorption des photons à faibles énergies au contact arrière. Cependant, le FF présente une valeur optimale dans la gamme de $0,05 - 0,1 \mu\text{m}$, ensuite, il diminue drastiquement en augmentant la valeur de la hauteur de l'EBR. Ce dernier, présente une valeur optimale autour de $0,2 \text{ eV}$ où une augmentation de sa hauteur au-delà de la valeur optimale n'améliore pas les performances quelque soit l'épaisseur de la couche.

III.2.2. L'épaisseur de l'EBR

Les performances de la cellule CIGS pour différentes épaisseurs en fonction de l'épaisseur du réflecteur d'électrons face arrière, W_{EBR} , qui varie entre 0% et 50% de l'épaisseur totale de l'absorbeur, seront étudiées. Nous avons fixé la hauteur de l'EBR à sa valeur optimale trouvée $0,2 \text{ eV}$ et nous avons varié l'épaisseur de la couche active entre $0,3$ et $2 \mu\text{m}$. Les résultats de simulation obtenus sont illustrés sur la figure (V.9). Cette dernière révèle, que tous les paramètres augmentent avec l'augmentation du W_{EBR} . Tous les paramètres à l'exception du V_{co} atteignent une valeur maximale pour une épaisseur W_{EBR} autour de 5% de l'épaisseur totale de la couche absorbante indépendamment de l'épaisseur de la couche absorbante. Toutefois, la valeur crête du rendement dépend de l'épaisseur de l'absorbeur. Par exemple, pour $0,3$, $0,5$ et $1 \mu\text{m}$ le rendement augmente, respectivement, de $3,1\%$, $2,5\%$ et $1,2\%$. Au-delà de cette valeur (5%), augmenter plus le W_{EBR} jusqu'à 50% , les performances diminuent légèrement en particulier, les faibles épaisseurs de l'absorbeur due au gap élevé de l'EBR. Cette diminution n'est pas cruciale, car la chute du J_{cc} est compensée par l'augmentation du V_{co} . On remarque aussi, que le rendement, pour les épaisseurs de l'absorbeur dans la gamme $0,5-1 \mu\text{m}$, peut atteindre les mêmes valeurs obtenues par une épaisseur standard ($2 \mu\text{m}$).

De ce fait, nos résultats obtenus sont en bon accord avec ceux rapportés expérimentalement par d'autres auteurs et qui indiquent que la valeur optimale de l'épaisseur de l'EBR est obtenue à 30 s d'évaporation du Gallium [41]. Enfin, pour les épaisseurs supérieures à $1 \mu\text{m}$, les performances du dispositif sont relativement indépendantes de la variation du W_{EBR} sauf pour les valeurs élevées de W_{EBR} où une augmentation est montrée à cause de la bande interdite élevée qui réduit la combinaison au volume.

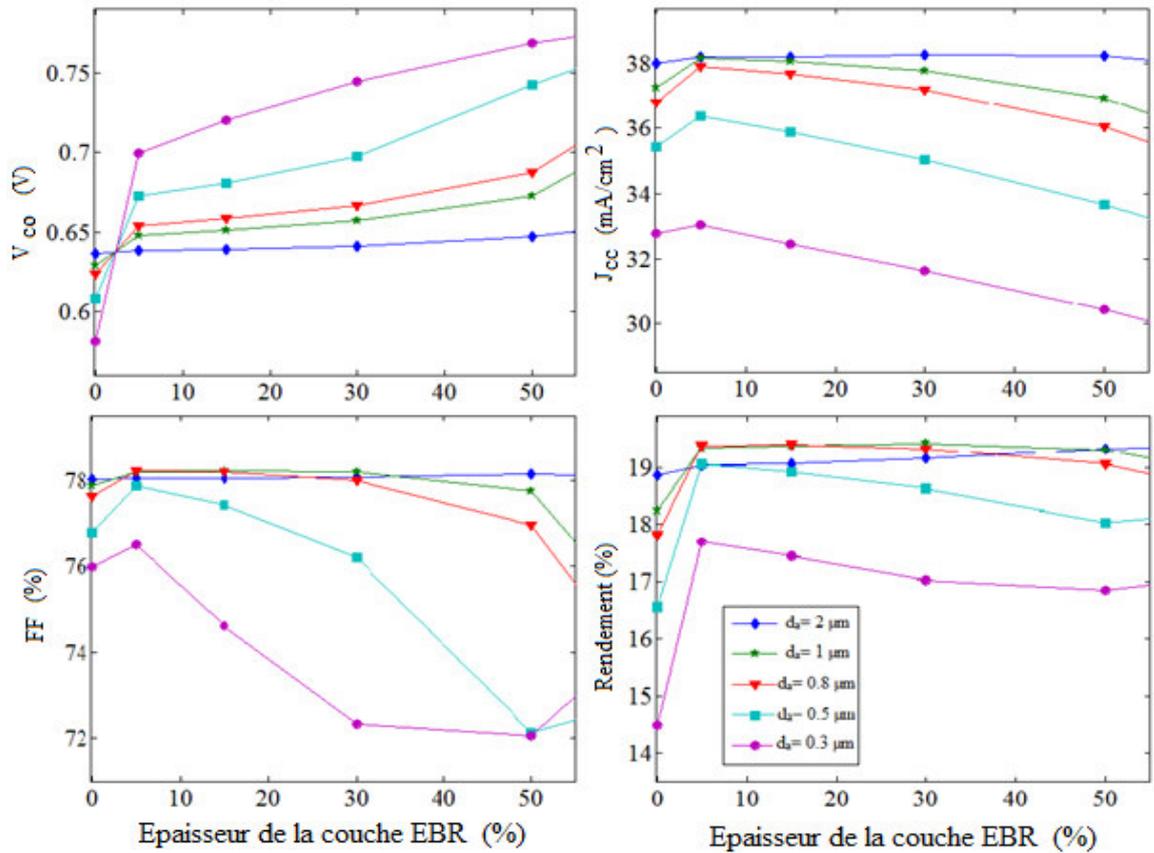


Figure (V.9): Les performances en fonction de l'épaisseur de l'RER pour différentes épaisseurs de la couche absorbante [39].

IV. Conclusion

Dans ce chapitre, la concentration des défauts dans les deux interfaces SDL/CIGS et CdS/SDL, la section efficace $\sigma_{n/p}$ et la bande interdite de la couche SDL ont été variés afin d'étudier leur influence sur les performances de la cellule CIGS. Nous avons montré que l'impact de cet excès est crucial. Une concentration de défauts élevée ou une large section de capture efficace, aux interfaces CdS/SDL et SDL/CIGS, pour les deux modèles étudiés : modèle de dopage et modèle de pincement, détruisent le rendement de la cellule de 19 % à 14 %, dépendant du modèle et de la section efficace. Le modèle de pincement est plus sensible aux variations de la section efficace $\sigma_{n/p}$ où le rendement diminue de 1,2 % à l'interface CdS/SDL et de 4-5 % à l'interface SDL/CIGS, et cela par rapport au modèle de dopage qui montre une diminution seulement de 0,2 % pour l'interface CdS/SDL et de 3 - 3,5 % pour SDL/CIGS. L'augmentation du gap de la couche SDL réduit les pertes du rendement de la cellule provoquées par les concentrations de défauts.

On a également présenté dans ce chapitre, l'effet de la variation de S_r et la présence de l'EBR au contact arrière quand l'épaisseur de l'absorbeur varie de 0,3 à 2 μ m. Plus l'épaisseur de l'absorbeur est réduite plus l'effet de la vitesse de recombinaison, S_r , devient plus important. La réduction de S_r , est significative, pour les absorbeurs extra minces, car elle leur permet d'atteindre des rendements comparables à ceux obtenus par des couches à épaisseur typique (2 μ m).

Pour améliorer les performances de la cellule, une grande vitesse de recombinaison ($S_r = 10^4$ cm/s) nécessite une hauteur de l'EBR au moins de 0,2 eV. L'effet bénéfique de la hauteur de l'EBR augmente avec l'augmentation de la S_R lorsque l'épaisseur de l'absorbeur est réduite. En outre, les résultats montrent que la valeur optimale de W_{EBR} , indépendamment de l'épaisseur de la couche CIGS, est obtenue à 5% de l'épaisseur totale de l'absorbeur.

Références chapitre V

- [1] T. Nakada and A. Kunioka, « Direct evidence of Cd diffusion into Cu(In,Ga)Se₂ thin films during chemical-bath deposition process of CdS films », Applied Physics Letters, Vol. 74, 1999, pp. 2444.
- [2] D. Liao and A. Rockett, « Cd doping at the CuInSe₂/CdS heterojunction », Journal of Applied Physics, Vol.93, 2003, pp.9380.
- [3] B. L. Lara and A. M. Fernández, « Cu(In,Ga)Se₂ Thin Film Characterization at different annealing conditions for use in solar cells », The fifth International Renewable Energy Conference IEEE, Hammamet, Mars 2014.
- [4] D. Schmid, M. Ruckh, F. Grunwald and H.W. Schock, « Chalcopyrite/defect chalcopyrite heterojunctions on the basis of CuInSe₂ », Journal of Applied Physics, Vol. 73, 1993, pp. 2902.
- [5] Y. Yan, K. M. Jones, J. Abushama, M. Young, S. Asher, M.M. Al-Jassim, and R. Noufi, « Microstructure of surface layers in Cu(In,Ga)Se₂ thin films », Applied Physics Letters, Vol.81, 2002, pp.1008.
- [6] S. M. Lee, S. Ikeda, Y. Otsuka, W. Septina, T. Harada and M. Matsumura, « Homogeneous electrochemical deposition of In on a Cu-covered Mo substrate for fabrication of efficient solar cells with a CuInS₂ photoabsorber », Electrochimica Acta, Vol. 79, 2012, pp.189.
- [7] Z. Li, X. Yu-Ming, X. Chuan-Ming, H. Qing, L. F. Fang, L. Chang-Jian and S. Yun, « Microstructural characterization of Cu-poor Cu (In, Ga)Se₂ surface layer », Thin solid Films, Vol. 520, 2012, pp. 2873.
- [8] T. Negami, N. Kohara, M. Nishitani and T. Wada, « Intrinsic limit of electrical properties of transparent conductive oxide films », Jpn. J. Appl. Phys. Part 2, Vol. 33, 1994, pp. L1251.
- [9] T. Walter, R. Herberholz, C. Müller and H. W. Schock, « Determination of Defect Distributions from Admittance Measurements and Application to Cu(In,Ga)Se₂ Based Heterojunctions », J. Appl. Phys., Vol. 80, 1996, pp. 4411.

- [10] S. B. Zhang and S.-H. Wei, « Reconstruction and energetics of the polar (112) and $(1^-1^-2^-)$ versus the nonpolar (220) surfaces of CuInSe_2 », *Phys. Rev. B*, Vol. 65, 2002, pp.081402.
- [11] M. Morkel, L. Weinhardt, B. Lohmüller, C. Heske, E. Umbach, W. Riedl, S. Zweigart and F. Karg, « Flat conduction-band alignment at the CdS/CuInSe_2 thin-film solar-cell heterojunction », *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 79, 2001, pp.4482.
- [12] S. B. Zhang, S.-Wei and A. Zunger, « A phenomenological model for systematization and prediction of doping limits in II-VI and I-III-VI₂ compounds », *J. Appl. Phys.*, Vol. 83, 1998, pp.3192.
- [13] D. Cahen and R. Noufi, « Surface passivation of polycrystalline, chalcogenide based photovoltaic cells », *Solar Cells*, Vol. 30, 1991, pp.53.
- [14] U. Rau, D. Braunger, R. Herberholz, H. W. Schock, J. F. Guillemoles, L. Kronik and D. Cahen, « Oxygenation and air-annealing effects on the electronic properties of Cu(In,Ga)Se_2 films and devices », *J. Appl. Phys.*, Vol. 86, 1999, pp.497.
- [15] M. Turcu, U. Rau, « Fermi level pinning at $\text{CdS/Cu(In,Ga)(Se,S)}_2$ interfaces: effect of chalcopyrite alloy composition », *J. Phys. Chem. Sol.*, Vol.64, 2003, pp.1591.
- [16] R. Herberholz, U. Rau, H. W. Schock, T. Haalboom, T. Gödecke, F. Ernst, C. Beilharz, K. W. Benz and D. Cahen, « Phase segregation, Cu migration and junction formation in Cu(In, Ga)Se_2 », *Eur. Phys. J. AP*, Vol. 6, 1999, pp.131.
- [17] J. E. Jaffe and A. Zunger, « theory of band-gap anomaly in ABC₂ chalcopyrite semiconductor », *Phys. Rev.B*, Vol. 29, 1984, pp.1882.
- [18] C. Heske, D. Eich, R. Fink, E. Umbach, T. van Buuren, C. Bostedt, L.J. Terminello, S. Kakar, M.M. Grush, T.A. Callcott, F.J. Himpsel, D.L. Ederer, R.C.C. Perera, W. Riedl, and F. Karg, « Observation of intermixing at the buried CdS/Cu(In,Ga)Se_2 thin film solar cell heterojunction », *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 74, 1999, pp.1451.
- [19] K. Ramanathan, H. Wiesner, S. Asher, D. Niles, R.N. Bhattacharya, J. Keane, M. Contreras, and R. Noufi, « High Efficiency CIGS Thin-Film Solar Cells Without Intermediate Buffer Layers », *Proceedings of the 2nd World Conference on Photovoltaic Solar Energy Conference*, Vienna, Austria, July 6-10, 1998, pp.477.

- [20] T. Nakada, « Nano-structural investigations on Cd-doping into Cu(In,Ga)Se₂ thin films by chemical bath deposition process, Thin Solid Films », Vol. 361-362, 2000, pp.346.
- [21] T. Wada, S. Hayashi, Y. Hashimoto, S. Nishiwaki, T. Sato, T. Negami and M. Nishitani, « High efficiency Cu(In,Ga)Se₂ (CIGS) solar cells with improved CIGS surface », in Proc. 2nd World Conf. on Photovolt. Energy Conv., 1998, pp. 403.
- [22] M. J. Romero, K. M. Jones, J. AbuShama, Y. Yan, M. M. Al-Jassim and R. Noufi, « Surface layer band gap widening in Cu(In,Ga)Se₂ thin films », Applied Physics Letters, Vol. 83, 2003, pp.1731.
- [23] C. S. Jiang, F. S. Hasoon, H. R. Moutinho, H. A. Al-Thani, M. J. Romero and M. M. Al-Jassim, « Direct evidence of a buried homojunction in Cu(In,Ga)Se₂ solar cells », Applied Physics Letters, Vol.82, 2003, pp.127.
- [24] K. Ramanathan, R. N. Bhattacharya, J. Granata, J. Webb, D. Niles, M. A. Contreas, H. Wiesner, F. S. Hanson and R. Noufi, in Conf. Rec. of the 26th IEEE Photovoltaic Spec. Conf. (IEEE, Piscataway, 1997), p. 319.
- [25] N. Touafek and R. Mahamdi, « Excess defects at the CdS/CIGS interface solar cells », Chalcogenide Letters , Vol. 11, 2014, pp. 589.
- [26] T. Minemoto, T. Matsui, H. Takakura, Y. Hamakawa, T. Negami, Y. Hashimoto, T. Uenoyama and M. Kitagawa, « Theoretical analysis of the effect of conduction band offset of window/CIS layers on performance of CIS solar cells using device simulation », Solar Energy Materials and Solar cells, Vol.67, 2001, pp.83.
- [27] A. Bouloufa, K. Djessas and A. Zegadi, « Numerical simulation of CuIn_xGa_{1-x}Se₂ solar cells by AMPS-1D », Thin Solid Films, Vol.515, 2007, pp.6285.
- [28] M. Leon, R. Serna, S. Levchenko, A. Nateprov, A. Nicorici, J.M. Merino and E. Arushanov, « Optical characterization of CuIn₃Se₅, CuGa₃Se₅ and CuGa₅Se₈ crystals by spectroscopic ellipsometry », physica status solidi, Vol.203 , 2006, pp.2913.
- [29] A. Luque and S. Hegedus, « Handbook of Photovoltaic Energy Conversion and Engineering»: John Wiley & Sons LTD, Chichester, West Sussex, England, 2003.

- [30] R. Noufi and K. Zwiebel, « High-Efficiency CdTe and CIGS Thin-Film Solar Cells: Highlights and challenges », The 4th World Conference Photovoltaic Energy Conversion. Hawaii, 7-12 May 2006, pp. 317.
- [31] S. S. Viswanathan, C. IK-Ho and L. Chi-Woo, « Progress in electrodeposited absorber layer for $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ (CIGS) solar cells », *Solar Energy*, Vol. 85, 2011, pp. 2666.
- [32] P. Chelvanathan, M. I. Hossain and N. Amin, « Performance analysis of copper-indium-gallium (CIGS) solar cells with various buffer layers by SCAPS », *Curr. Appl. Phys.*, Vol. 10, 2010, pp.387.
- [33] O. Lundberg, M. Bodegard, J. Malmstrom and M. Stolt, « Influence of the $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ thickness and Ga grading on solar cell performance », *Prog. Photovoltaics Res. Appl.*, Vol.11, 2003, pp. 77.
- [34] Z. Jehl et al., «Thinning of CIGS solar cells: part II: cell characterizations », *Thin Solid Films*, Vol. 519, 2011, pp. 7212.
- [35] B. Vermang, V. Fjallstrom, J. pettersson, P. Salomé and M. Edoff, « Development of rear surface passivated $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ thin film solar cells with nano-sized local rear point contacts », *Solar Energy Materials and Solar cells*, Vol. 117, 2013, pp. 505.
- [36] W.W. Hsu et al., « surface passivation of $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ using atomic layer deposited Al_2O_3 », *Applied Physics Letters*, Vol. 100, 2012, pp. 1-4.
- [37] M. Nerat, Copper- indium-gallium-selenide (CIGS) solar cells with localized contacts for achieving high performance,*Solar Energy Materials and Solar cells*, Vol. 104, 2012,p. 152.
- [38] W.W. Hsu et al., « surface passivation of $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ using atomic layer deposited Al_2O_3 », *Applied Physics Letters*, Vol. 100, 2012, pp. 1-4.
- [39] N. Touafek and R. Mahamdi, « Back Surface Recombination Effect on the Ultra-Thin CIGS Solar Cells by SCAPS », *International journal of Renewable Energy Research*, Vol.4, 2014, pp. 958.

[40] K. Orgassa, « Coherent Optical Analysis of the ZnO/CdS/Cu(In,Ga)Se₂ Thin Film Solar Cell », thèse de Doctorat, Université de Stuttgart, 2004.

[41] S. R. Seyrling, « Advanced Concepts for Cu(In,Ga)Se₂ Thin Film Solar Cells », thèse de Doctorat, ETH Zurich, 2011.

Conclusion générale

Dans ce travail nous avons étudié les caractéristiques électriques d'une cellule solaire (n-p) à hétérojonction (CdS/CIGS) sous l'éclairement AM1.5 en utilisant la modélisation analytique, par le biais d'un programme écrit en Matlab, et des logiciels de simulation numérique unidimensionnelle à savoir : l'AMPS-1D et le SCAPS-1D. L'étude a permis de dégager les résultats suivants:

- Les résultats obtenus indiquent que la réduction de l'épaisseur de la couche du CdS améliore le rendement de la cellule avec un taux de 0.01%/nm, et que le rendement est plus sensible à l'épaisseur de la couche d'absorption, où nous notons une amélioration du rendement de 0.5%/μm en augmentant l'épaisseur du CuInSe₂. Nous avons conclu également que l'influence du gap du CuInSe₂ est plus cruciale que celui du CdS où le rendement atteint le 27% pour un gap égal à 1.2 eV et une épaisseur de 2000 nm.
- L'ajout du gallium a un effet bénéfique sur les performances de la cellule, où le rendement atteint une valeur optimale lorsque le taux du gallium dans le matériau CIGS prend une valeur de (30%).
- Pour un gradient de gap inverse, le profil sublineaire est le meilleur comme un gradient de gap dans la ZCE. Nous constatons également, que la distance sur la quelle le gap est graduel ne doit pas dépasser la largeur de la ZCE. En outre, la valeur maximale du gap frontal, E_{gfront} , est 1.28 eV.
- Pour un gradient de gap normal le gap qui suit la forme d'un profil proche de linéaire affecte significativement les performances de la cellule où nous avons trouvé une différence entre + 0,5% et - 0,2% comparé gap linéaire, mais la variation du gap qui prend la forme d'un profil de Fermi dans l'absorbeur est plus décisive et a plus d'impact sur les performances par rapport au profil proche du linéaire où la différence du rendement varie entre +1% et -0.9%.
- La concentration de défauts élevée ou une large section efficace, aux interfaces CdS/SDL et SDL/CIGS, pour les deux modèles étudiés: modèle de dopage et modèle de pincement, détruisent le rendement de la cellule de 19 % à 14 %, dépendant du modèle et de la section efficace.

- Le modèle de pincement est plus sensible aux variations de la section de capture efficace $\sigma_{n/p}$ où le rendement diminue de 1.2% à l'interface CdS/SDL et de 4-5% à l'interface SDL/CIGS, par rapport au modèle de dopage qui montre une diminution de 0.2% pour l'interface CdS/SDL et 3-3.5% pour SDL/CIGS.
- L'élargissement de la bande interdite de la couche de surface du CIGS (gap du SDL) fournit une certaine tolérance aux défauts excédentaires au niveau des interfaces SDL/CdS et SDL/CIGS. Une augmentation du rendement d'environ 3%, lorsque cette bande interdite passe de 1.2 à 1.5 eV est notée.
- La réduction de la vitesse de recombinaison (S_r) est significative pour les absorbeurs extraminces. Elle leur permet d'atteindre des rendements comparables à ceux obtenus par des couches à épaisseur typique (2 μ m).
- Une grande vitesse de recombinaison ($S_r = 10^4$ cm/s) nécessite une hauteur du réflecteur d'électron face arrière (EBR) au moins de 0,2 eV pour améliorer les performances de la cellule. L'effet bénéfique de la hauteur de l'EBR augmente avec l'augmentation de la S_r lorsque l'épaisseur de l'absorbeur est réduite. En outre, les résultats montrent que la valeur optimale de l'épaisseur de l'EBR (W_{EBR}), indépendamment de l'épaisseur de la couche CIGS, est obtenue à 5% de l'épaisseur totale de l'absorbeur.

En perspective à ce travail, il est intéressant d'étudier l'interface à la jonction p-n en utilisant d'autres matériaux comme couche tampon tels que le Zn(S,O), ZnMgO, Sn(O,S)₂ etc., comme on peut étudier l'influence de la concentration de défauts d'interface CdS/CIGS en augmentant le taux de Ga dans le matériau.

Conclusion générale

Dans ce travail nous avons étudié les caractéristiques électriques d'une cellule solaire (n-p) à hétérojonction (CdS/CIGS) sous l'éclairement AM1.5 en utilisant la modélisation analytique, par le biais d'un programme écrit en Matlab, et des logiciels de simulation numérique unidimensionnelle à savoir : l'AMPS-1D et le SCAPS-1D. L'étude a permis de dégager les résultats suivants:

- Les résultats obtenus indiquent que la réduction de l'épaisseur de la couche du CdS améliore le rendement de la cellule avec un taux de 0.01%/nm, et que le rendement est plus sensible à l'épaisseur de la couche d'absorption, où nous notons une amélioration du rendement de 0.5%/μm en augmentant l'épaisseur du CuInSe₂. Nous avons conclu également que l'influence du gap du CuInSe₂ est plus cruciale que celui du CdS où le rendement atteint le 27% pour un gap égal à 1.2 eV et une épaisseur de 2000 nm.
- L'ajout du gallium a un effet bénéfique sur les performances de la cellule, où le rendement atteint une valeur optimale lorsque le taux du gallium dans le matériau CIGS prend une valeur de (30%).
- Pour un gradient de gap inverse, le profil sublineaire est le meilleur comme un gradient de gap dans la ZCE. Nous constatons également, que la distance sur la quelle le gap est graduel ne doit pas dépasser la largeur de la ZCE. En outre, la valeur maximale du gap frontal, E_{gfront} , est 1.28 eV.
- Pour un gradient de gap normal le gap qui suit la forme d'un profil proche de linéaire affecte significativement les performances de la cellule où nous avons trouvé une différence entre + 0,5% et - 0,2% comparé gap linéaire, mais la variation du gap qui prend la forme d'un profil de Fermi dans l'absorbeur est plus décisive et a plus d'impact sur les performances par rapport au profil proche du linéaire où la différence du rendement varie entre +1% et -0.9%.
- La concentration de défauts élevée ou une large section efficace, aux interfaces CdS/SDL et SDL/CIGS, pour les deux modèles étudiés: modèle de dopage et modèle de pincement, détruisent le rendement de la cellule de 19 % à 14 %, dépendant du modèle et de la section efficace.

- Le modèle de pincement est plus sensible aux variations de la section de capture efficace $\sigma_{n/p}$ où le rendement diminue de 1.2% à l'interface CdS/SDL et de 4-5% à l'interface SDL/CIGS, par rapport au modèle de dopage qui montre une diminution de 0.2% pour l'interface CdS/SDL et 3-3.5% pour SDL/CIGS.
- L'élargissement de la bande interdite de la couche de surface du CIGS (gap du SDL) fournit une certaine tolérance aux défauts excédentaires au niveau des interfaces SDL/CdS et SDL/CIGS. Une augmentation du rendement d'environ 3%, lorsque cette bande interdite passe de 1.2 à 1.5 eV est notée.
- La réduction de la vitesse de recombinaison (S_r) est significative pour les absorbeurs extraminces. Elle leur permet d'atteindre des rendements comparables à ceux obtenus par des couches à épaisseur typique (2 μ m).
- Une grande vitesse de recombinaison ($S_r = 10^4$ cm/s) nécessite une hauteur du réflecteur d'électron face arrière (EBR) au moins de 0,2 eV pour améliorer les performances de la cellule. L'effet bénéfique de la hauteur de l'EBR augmente avec l'augmentation de la S_r lorsque l'épaisseur de l'absorbeur est réduite. En outre, les résultats montrent que la valeur optimale de l'épaisseur de l'EBR (W_{EBR}), indépendamment de l'épaisseur de la couche CIGS, est obtenue à 5% de l'épaisseur totale de l'absorbeur.

En perspective à ce travail, il est intéressant d'étudier l'interface à la jonction p-n en utilisant d'autres matériaux comme couche tampon tels que le Zn(S,O), ZnMgO, Sn(O,S)₂ etc., comme on peut étudier l'influence de la concentration de défauts d'interface CdS/CIGS en augmentant le taux de Ga dans le matériau.

Résumé

Ce travail porte sur l'optimisation des paramètres physiques et géométriques de la cellule solaire à base de $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$, l'influence du profil d'un gradient de gap dans l'absorbeur, ainsi que les propriétés des régions d'interfaces CdS/CIGS et CIGS/Mo sur les paramètres de sortie de la cellule étudiée, par le biais des logiciels de simulation AMPS-1D et SCAPS-1D.

Les résultats de l'optimisation ont montré l'influence des paramètres géométriques et physiques ainsi que la fraction du Gallium (x) dans l'alliage sur les performances de la cellule.

Pour les profils proposés, l'influence de la forme du gradient de gap sur les performances de la cellule solaire a été simulée. Les résultats montrent qu'un gradient de gap à profil de Fermi dans l'absorbeur a plus d'impact sur les performances par rapport au profil proche du linéaire.

Les défauts de la couche SDL présente à l'interface CdS/CIGS ainsi que sa bande interdite influent énormément sur les performances de la cellule. Une large bande interdite de cette couche réduit les pertes du rendement de la cellule provoquées par les concentrations de défauts. À l'interface CIGS/Mo, les résultats obtenus ont révélé que la vitesse de recombinaison face arrière et la présence de l'EBR ont une grande influence sur les paramètres électriques de la cellule lorsque l'épaisseur de l'absorbeur est réduite.

Mots- clés : Cellule solaire, CIGS, gradient de gap, AMPS, SCAPS, SDL, EBR.

Abstract

This work focuses on the optimization of the physical and geometrical parameters of solar cell based on the $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$, the influence of the profile of grading band gap in the absorber as well as the properties of the regions interfaces CdS/CIGS and CIGS/Mo on the output parameters of the cell studied, using the AMPS-1D and SCAPS-1D simulation tool.

The optimization results showed the influence of the geometrical and physical parameters as well as the fraction of the gallium (x) in the alloy on the cell performance. The influence of the profile of the band gap grading on the performance of the solar cell, for different profiles is simulated. The results exhibit that the Fermi profile grading band gap in the absorber has more impact on the performance compared to the profile close to the linear.

The defects of the SDL layer present at the interface CdS/CIGS and its band gap greatly influence the performance of the cell. A wide band gap of this layer reduces the loss of cell efficiency caused by concentrations of defects. At the interface CIGS/Mo, the results showed that the back surface recombination velocity and the presence of the Electron Back Reflector (EBR) have a great influence on the electrical parameters of the cell when the thickness of the absorber is reduced.

Keys-words: Solar cell, CIGS, grading band gap, AMPS, SCAPS, SDL, EBR.

ملخص

هذا العمل يتناول الاستفادة المثلى من العوامل الفيزيائية والهندسية للخلية الشمسية ذات أساس $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ وكذا تأثير شكل منحي التدرج الفجوي في الطبقة الممتصة إضافة إلي خواص المناطق البينية ل CdS/CIGS و CIGS/Mo على معالم مخرج الخلية قد درسا من خلال برامج المحاكاة AMPS-1D و SCAPS-1D .

لقد أظهرت النتائج المتحصل عليها تأثير العوامل الهندسية والفيزيائية وكذلك نسبة الغاليوم (x) في سبائك CIGS في أداء و قدرات الخلية.

لدراسة تأثير شكل التدرج الفجوي على أداء قدرات الخلايا الشمسية، هناك أنماط مختلفة اقترحت. أظهرت النتائج المتحصل عليها أن التدرج الفجوي الذي يأخذ شكل فيرمي (Fermi) في الطبقة الممتصة للضوء له التأثير الأكبر على أداء و قدرات الخلية الشمسية مقارنة بشكل المنحي الفجوي القريب من الخطية. إن عيوب الطبقة الموجودة علي سطح المعدن CdS/CIGS و كذا شريط عبورها يؤثران بشكل كبير علي أداء و قدرات الخلية الشمسية. إن زيادة قيمة شريط العبور لهذه الطبقة (SDL) يقلل من فقدان مردود الخلية الشمسية التي تسببها تراكيز العيوب.

في المنطقة البينية CIGS/Mo ، أظهرت النتائج المتحصل عليها بأن سرعة إعادة التركيب في الجهة الخلفية و كذا وجود حقل عاكس للإلكترونات (EBR) لهما تأثير كبير على العوامل الكهربائية للخلية عندما يتم خفض سمك الطبقة الممتصة للضوء.

الكلمات - المفتاحية: خلية شمسية، التدرج الفجوي، AMPS-1D، CIGS، SCAPS-1D، طبقة العيوب SDL، حقل عاكس للإلكترونات EBR،

Production scientifique

Articles

- 1- N. Touafek, R. Mahamdi, "Excess Defects At The CdS/CIGS Interface Solar Cells", Chalcogenide Letters, Vol. 11, N° 11, pp. 589-596, 2014.
- 2- N. Touafek, R. Mahamdi, "Back Surface Recombination Effect on the Ultra-Thin CIGS Solar Cells by SCAPS", International Journal of Renewable Energy Research, Vol. 4, N° 4, pp. 958-964, 2014.
- 3- N. Touafek, M.S. Aida, R. Mahamdi, "CuInSe₂ Solar Cells Efficiency Optimization", American Journal of Materials Science, Vol. 2, N° 5, pp. 160-164, 2012.

Conférences

- 1- N. Touafek, R. Mahamdi, M.S. Aida, A. Bouloufa, "Influence of band gap profiling in front part of absorber on CIGS solar cell performance", the fifth International Renewable Energy Congress IREC-2014, Hammamet, Tunisie, 25-27 Mars, 2014.
- 2- N. Touafek, R. Mahamdi, " Influence of band gap profiling on the performance of CIGS based solar cells", The Second International Conference on Electrical Engineering And Control Applications ICEECA'14, Constantine, Algerie, pp. , 18-20 Novembre, 2014.
- 3- N. Touafek, R. Mahamdi, "Impact of [Ga]/[In+Ga] Ratio on the Generation-Recombination Rates of Cu(In,Ga)Se₂ Solar Cells," la 2^{ème} conférence Internationale des énergies renouvelables CIER-2014, Monastir, Tunisie, 19-21 décembre, 2014.

EXCESS DEFECTS AT THE CdS/CIGS INTERFACE SOLAR CELLS

N. TOUAFEK*, R. MAHAMDI^a

Department of Electronics University Constantine-1 Algeria

^aLea Department of Electronics Hadj Lakhdar University Batna Algeria

The excess defects concentration in the heterojunction solar cells interface CdS/CIGS are investigated by Solar Cell Capacitance Simulator in 1 Dimension SCAPS-1D. The obtained results, for models studied: doping model and pinning model, show that the excess defects concentration at both CdS/SDL and SDL/CIGS interfaces can deteriorate the photovoltaic power conversion efficiency of the solar cells by about 3-5 %, depending on the model and capture cross-sections. The doping model provides a markedly higher tolerance to internal interface recombination when compared to the pinning ones. The excess defects at the interface CdS/SDL is not as critical as the impact of the excess defect at the SDL/CIGS on the performance of the CIGS solar cells. However, the capture cross-sections σ_{np} in both interfaces varying from 10^{-15} to 10^{-13} cm² affect dramatically the performance of the solar cells. The loss in the performance caused by the excess defects concentrations can be recovered by the augmentation of the band gap of SLD layer. The results predict that passed from 1.2 to 1.5 eV increase the efficiency by about 3 %.

(Received August 15, 2014; Accepted November 14, 2014)

Keywords: Cu(In,Ga)Se₂, Solar cell, SDL, defects, SCAPS-1D

1. Introduction

Thin film solar cells are comprised of several layers of different semiconductors and metals, and thus the device has a large number of interfaces where inter-diffusion of atoms between the different materials is possible [1, 2]. In general the solar cell consists of substrate, TCO, window layer (n-type), absorber layer (p-type) and metal contact layer. Each of the component materials has different physical and chemical properties and each affects the overall performance of the device in some form or the other. The interfaces occur between the different layers, generally play an important role in this film solar cells devices, can cause stresses, defects, interface states, and surface recombination centers. Since each layer has different crystal structure, microstructure, lattice constant, electron affinity, diffusion coefficient, mobility, etc. Also, the interface properties get modified during device processing as a result of growth process involving the sequential deposition of multi-layers at different deposition conditions. In addition, annealing conditions [3], post-deposition treatments involving high-temperature annealing can alter the interface and inter-grain properties, which may result in interface defects, which cause undesirable recombination of carriers. As a result, the device parameters such as open-circuit voltage, current, Fill Factor and efficiency can be modified significantly. Generally, it is not clarified under which conditions defect formation occurs and how it affects the device behavior. In the CIGS solar cells, that have the best performing thin film technologies [4], the Studies show that the electrical properties are strongly affected by the CIGS/CdS interface properties. XPS studies show the presence of an In-rich n-type material at the surface of the p-type CIGS and causes large band bending that contributes to the device performance [5]. This layer identified as a surface defect layer (SDL), structurally similar to the bulk CIGS but have different compositional distributions [5, 6]. However, So far, this layer is not so well known. It is not even clear if it exists in finished CIGS devices. Some research exhibit that this layer is not present in the CIGS high band-gap.

* Corresponding author: ntouafek@yahoo.fr

Recently, it has been proposed that an In-excess n-type conductivity layer is present at the interface region of the CIGS film and the p-n junction is formed between p-CIGS and n-SDL [7] and therefore, the p-n junction in CIGS solar cells is a homojunction located in the CIGS film [8]. So, at the junction CdS/CIGS there are two important interfaces: SDL/CIGS and CdS/SDL.

The purpose of this work is to examine using SCAPS-1D [9] simulation package, the influence of the excess defects at both SDL/CIGS and CdS/SDL interfaces, as well as the effect of the band-gap widening at the surface absorber layer on the electrical parameters of CIGS solar cell.

2. Device simulation Details

2.1 Cell structure

CIGS solar cells with the ZnO/CdS/SDL/CIGS/Mo structure schematically sketched in Fig.1. The CIGS thin -film solar cell consists of the following layers: substrate soda lime glass (SLG); a Molybdenum (Mo), to realize an ohmic back contact; a p-CIGS absorber layer; thin layer of which is usually intentionally made Cu-poor named the Surface Defect Layer (SDL), expected to play an important role in the performance of the high efficiency $\text{CuIn}_{1-x}\text{G}_x\text{Se}_2$ based solar cells [10-11]; an n-type buffer layer; typically CdS [12]; an undoped ZnO layer namely a transparent conduction oxide (TCO), and an n+-ZnO transparent front contact . Metallic Ni/Al contact grids complete the cell.

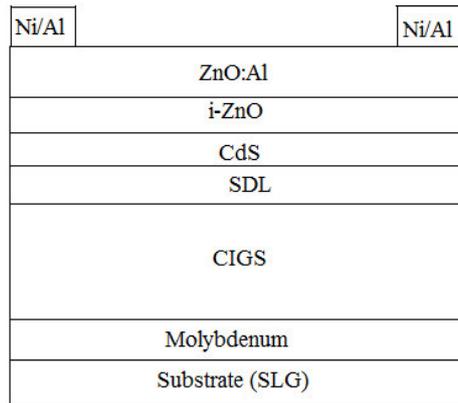


Fig.1. Schematic structure of CIGS based thin-film solar cells (layer thicknesses not to scale)

2.2 Numerical modeling

The merit of the numerical methods is to test and predict the results and the influence of the process parameters on the device without fabrication. In this work, The CIGS solar cells are modeled using the latest version (3.0.0.2) of SCAPS [9,13,14] to predict the changes to CIGS based solar cell performance that are introduced by the excess defects at the interface between CdS and CIGS layers. This software tool is a one dimensional solar cell device simulator, developed at the university of Gent [15], allows the definition of thin-film solar cell devices stacks of layers with a large set of parameters and solves the fundamental solar-cell equations (the Poisson equation and continuity equations for electrons and holes) for each point. Definable parameters include the thickness, doping, defect and interface-state densities and cross-sections, the optical absorption coefficient, the band-gap and the electron affinity. Furthermore, many of the properties can be specified as gradients of various forms. Recombination in deep bulk levels and their occupation is described by the Shockley-Read-Hall (SRH) formalism. Recombination at the interface states is described by an extension of the SRH formalism, allowing the exchange of electrons between the interface state and the two adjacent conduction bands, and of holes between the state and the two adjacent valence bands [16,17] .We consider, in this study, two models: the

doping model, in which the surface layer is an n-type doped material and the pinning model, which views the surface layer as a material that is type inverted due to Fermi-level pinning by donor-like defects at the interface with CdS. The Fermi level pinning was modeled by a high density, 3.10^{13}cm^{-2} , of donor defects close to the CIGS conduction band ($E_F=0.2\text{ eV}$). Here small capture cross sections of 10^{-18} cm^2 were chosen to separate pinning defects from recombination defects. All the bulk defects are at mid gap of the layers [18]. The CIGS cell is simulated under AM1.5 spectrum irradiance with a power density of $100\text{mW}/\text{cm}^2$ and at temperature of 300 K. All electrical properties of SDL were chosen similar to the bulk except the band-gap, doping, and the carrier mobilities. Lower mobilities were chosen since this layer could be more disordered than the bulk material.

3. Results and discussion

The current-voltage (J-V) results from simulation using the parameters given in table 1 are compared with measurement data from [19] in the Fig.2. The results show that the measured JV curve is very well reproduced by the parameters model which validates our set of parameters as a baseline for simulating the effect of the excess defects at the both CdS/SDL and SDL/CIGS interfaces on solar cell performance. The JV parameters from simulations and measurements are displayed in table 2.

3.1. Influence of excess defects at the CdS/SDL interface

The primary function of CdS layer in the structure is to form the heterojunction with CIGS layer and protect the surface defect layer. So, the deposition method should be chosen that the minimum quantity of interface defects is introduced. In the ideal case without interface states, positive charges in the ZnO/CdS part of the junction are balanced by negative charges in the SCR of width W_a in the CIGS absorber:

$$Q_n + qd_wN_w + qd_bN_b = qN_aW_a \quad (1)$$

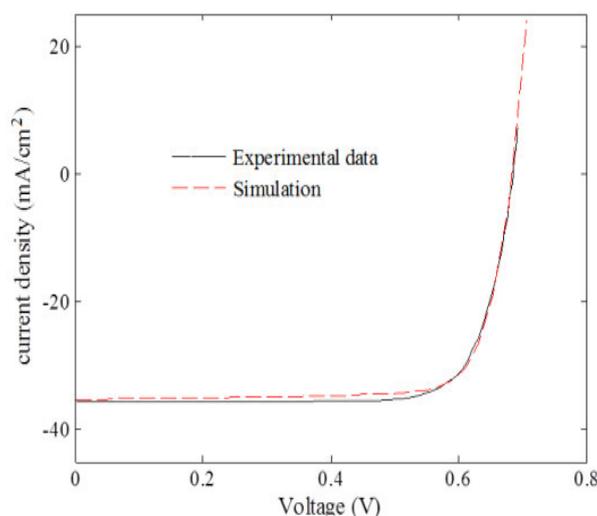


Fig.2. comparison between the (J-V) curves for the simulated and the reported experimental data [19]

Here Q_n are the charges per unit area in a depletion layer of the doped ZnO window layer, q is the elementary charge; N_w , N_b and N_a are the doping concentrations in the i-ZnO, CdS and

CIGS layers with the thickness d_w , and d_b , respectively ; W_a is the width of the SCR in the CIGS layer. From the equation (1), it can be seen that an introduction of negatively charged states at the interface between CdS/CIGS (the left side of the Eq 1) reduces the width W_a of the space charge region in the absorber layer. Therefore, the barrier for holes at the interface decreases which leads to a higher recombination velocity at the CdS/CIGS interface. This explains the importance of the study of the influence of the excess defects at this interface on the solar cell parameters.

The models studied, in Fig.3 the pinning model (black lines) gives the best performance compared to the doping model (red lines). This plot shows the dependence of the photovoltaic output parameters efficiency η , short circuit current density J_{sc} , open circuit voltage V_{oc} , and the fill factor FF on the concentration of the defects at the CdS/SDL interface and captures the cross sections σ_n and σ_p for electrons and holes, respectively, $\sigma_n = \sigma_p = 10^{-15}$, 10^{-14} and 10^{-13} cm^2 . Beyond 10^{10} cm^{-2} the performance except the V_{oc} , drops with increasing the defect from 10^{10} to 10^{12} cm^{-2} especially for the pinning model. Increasing the capture cross-sections from 10^{-15} to 10^{-13} we note a drop of efficiency about 1.2 %, contrary to the doping model where the drop doesn't exceed 0.2 %. However, for the pinning model, the efficiency of solar cell is strongly influenced by the capture cross-sections. This effect of $\sigma_{n/p}$ is best seen at the highest defect concentration, where the efficiency suffers a reduction of 0.8 to 1.1%, depending on $\sigma_{n/p}$.

3.2. Influence of excess defects at the SDL/CIGS interface

Excess defects located at the SDL/CIGS interface are also important as possible recombination traps at this interface. Fig.4 shows the role of both defect concentration and the capture cross-sections in determining the electrical parameters of cell for doping model (red lines) and pinning model (bleu lines). We can see that the excess defects at the SDL/CIGS interface influence strongly the all electrical parameters (J_{sc} , V_{oc} , FF, and efficiency) that decrease with increasing the defect concentration for both models. It is clear from the plot that beyond 10^{10} cm^{-2} of defect concentration, the effect of capture cross-sections appears and becomes significant for high defect concentration. The pinning model is more sensitive to the variation of the capture cross-sections which leads to a drop of efficiency by about 4-5% , For example , for defect concentration equal 10^{12} cm^{-2} , the efficiency decreased from 18.9 to 14 % for $\sigma_{n/p} = 10^{-15}$ and $\sigma_{n/p} = 10^{-13} \text{ cm}^2$, compared to the doping model which shows a decrease between 3 and 3.5%.

Table2. Measured and simulated solar cell JV-parameters

	V_{oc} (mV)	J_{sc} (mA/cm ²)	FF (%)	Efficiency (%)
simulation	684	-35.239	0.789	19.04
Experimental	688	-35.7	0.781	19.20

Table 1 Input parameter values for the simulation of CIGS solar cells with SCAPS-1D

	Layer properties				
	CIGS	SDL	CdS	i: ZnO	ZnO:Al
W (μm)	2	0.030	0.05	0.2	0.4
E _g (eV)	1.15	variable	2.4	3.3	3.3
χ (eV)	4.5	4.5	4.45	4.55	4.55
ϵ/ϵ_0	13.6	13.6	10	9	9
N _c (cm ⁻³)	2*10 ¹⁸	2*10 ¹⁸	1.3*10 ¹⁸	3.1*10 ¹⁸	3.1*10 ¹⁸
N _v (cm ⁻³)	1.5*10 ¹⁹	1.5*10 ¹⁹	9.1*10 ¹⁸	1.8*10 ¹⁹	1.8*10 ¹⁹
v _n (cm/s)	3.9*10 ⁷	3.9*10 ⁷	3.1*10 ⁷	2.4*10 ⁷	2.4*10 ⁷
v _p (cm/s)	1.4*10 ⁷	1.4*10 ⁷	1.6*10 ⁷	1.3*10 ⁷	1.3*10 ⁷
μ_n (c)	100	10	72	100	100
μ_p (cm ² /Vs)	12.5	1.25	20	31	31
doping (d)	1*10 ¹⁶ (a)	variable	5*10 ¹⁷ (d)	1*10 ¹⁷ (d)	1*10 ²⁰
Bulk defects properties					
N (cm ⁻³)	1.1*10 ¹⁴ (d)	1.1*10 ¹⁴ (d)	5*10 ¹⁶ (a)	1*10 ¹⁶ (a)	1*10 ¹⁶ (a)
σ_n (cm ²)	10 ⁻¹³	10 ⁻¹³	10 ⁻¹⁵	10 ⁻¹⁵	10 ⁻¹⁵
σ_p (cm ²)	10 ⁻¹⁵	10 ⁻¹⁵	5*10 ⁻¹³	5*10 ⁻¹³	5*10 ⁻¹³
Interface properties					
	CIGS/SDL	SDL/CdS	CdS/i-ZnO		
N (cm ⁻³)	variable	variable	10 ⁹ (a)		
σ_n (cm ²)	variable	variable	10 ⁻¹⁵		
σ_p (cm ²)	variable	variable	10 ⁻¹³		

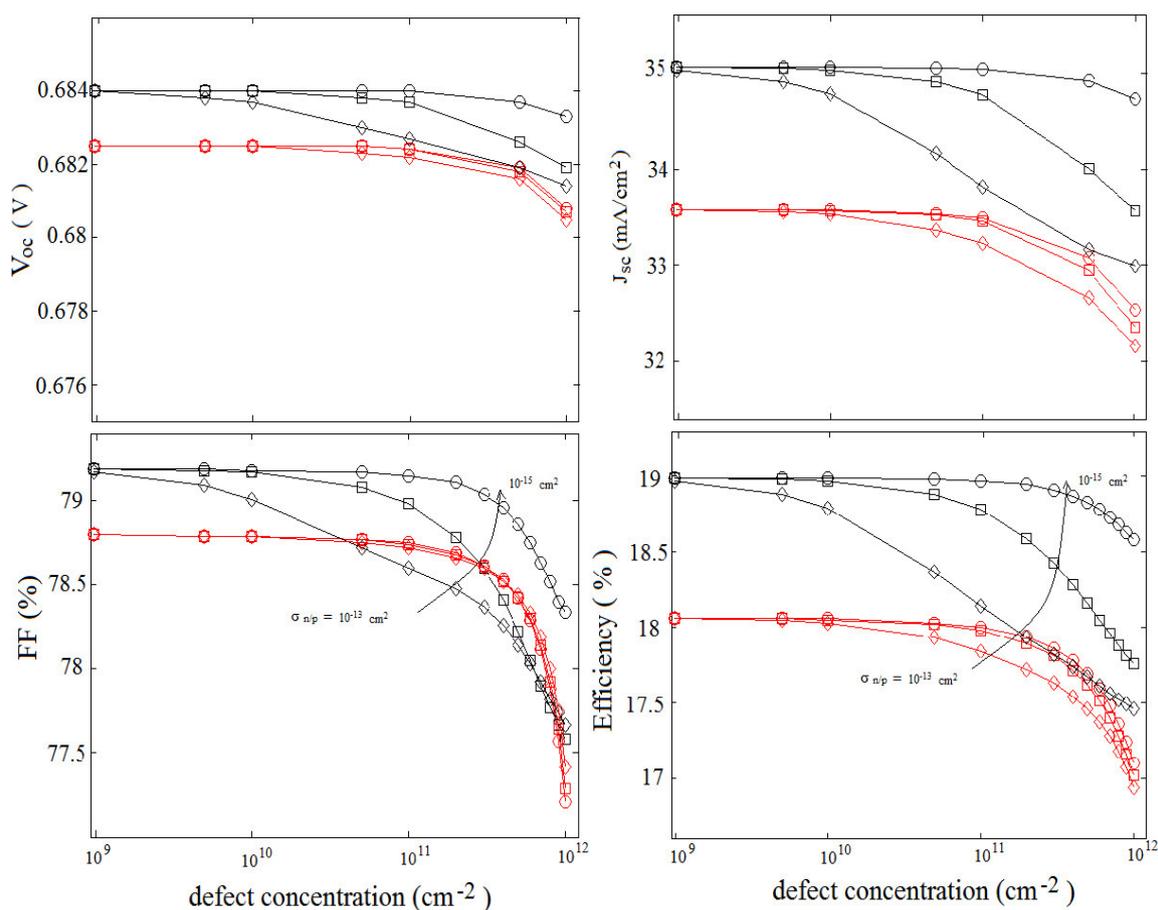


Fig.3. Simulated dependence of the efficiency η , short circuit current density J_{sc} , open circuit voltage V_{oc} , and fill factor FF on the defect concentration at the CdS/SDL interface. The pinning model (black lines) and doping model (red lines) capture cross-sections σ_{np} for electrons and holes are chosen $\sigma_n = \sigma_p = 10^{-13}/10^{-14}/10^{-15}$ cm² (diamonds, squares, circles).

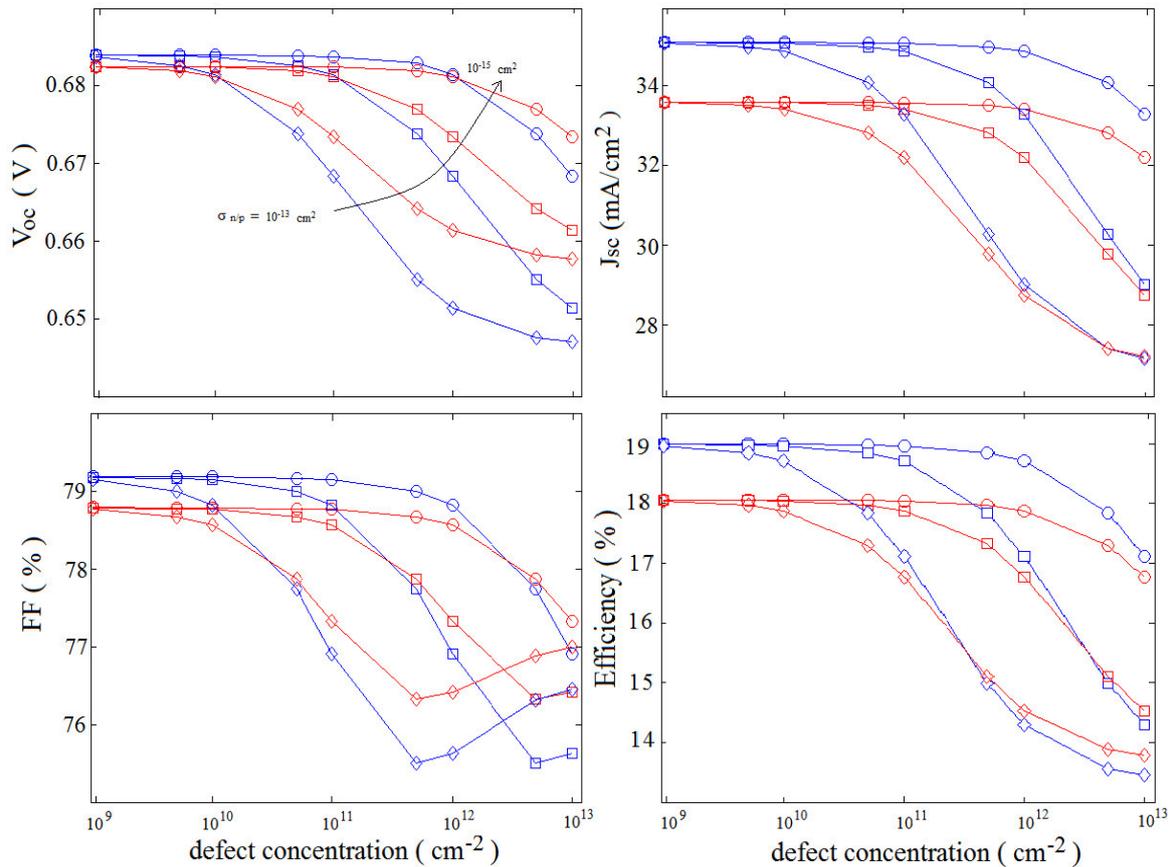


Fig.4. Simulated dependence of the efficiency η , short circuit current density J_{sc} , open circuit voltage V_{oc} , and fill factor FF on the defect concentration at the SDL/CIGS interface. The pinning model (bleu lines) and doping model (red lines). capture cross-sections σ_{np} for electrons and holes are chosen $\sigma_p = \sigma_n = 10^{-13}/10^{-14}/10^{-15} \text{ cm}^2$ (diamonds, squares, circles).

3.3. Influence of the band-gap widening

A major role in the suppression of interface recombination is played by the Cu-poor surface defect layer (SDL) that forms in Cu-poor chalcopyrite and leads to surface band-gap widening [20]. This layer is expected to play an important role in the performance of the high efficiency Cu $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ based solar cells [10,11]. So, evaluating its effect on the performances of the solar cells is important. The optical of surface defect layer (SDL) is similar to that of CIGS [21]. So, only the SDL electron affinity was adjusted according to the band-gap variation in the SDL, keeping valence band offset between the surface region and the bulk region of CIGS layers at 0.1 eV. The capture cross-section is fixed to $\sigma_{np} = 10^{-13} \text{ cm}^2$, and the defect concentration in both models, is varied in the range from 10^9 - 10^{12} cm^2 . The band-gap of the SDL layer is varied from 1.2 to 1.5 eV. Fig.5 shows calculated efficiency with defect concentration and band-gap energy Fig.5a present the results at the SDL/CIGS interface and Fig.5b at the CdS/SDL ones, the doping model (bleu lines) and the pinning model (black lines). For a both models, increasing the defects beyond 10^{11} cm^2 the impact of band-gap widening becomes more pronounced where efficiency increase by about 3% when passed from 1.2 to 1.5 eV because increasing the SDL band-gap reduces the conduction band offset at CdS/SDL interface which leads to an improvement of the performance of solar cells.

4. Conclusion

In the present study, the effect of excess defect at the CdS/CIGS interface on the performance of solar cell is investigated numerically by using one dimensional SCAPS-1D computer software. In the simulation studies, the defects concentration in a both SDL/CIGS and CdS/SDL interfaces, the capture cross-sections $\sigma_{n/p}$ and the SDL band-gap are varied to study their influence on the performance of CIGS solar cells. We have shown that the impact of this excess is crucial. Increasing defect concentration or large capture cross-sections, both at CdS/SDL and SDL/CIGS interfaces, for the models studied: doping model and pinning model, deteriorate the device efficiency from 19% to levels of 14%, depending on the model and the capture cross section.

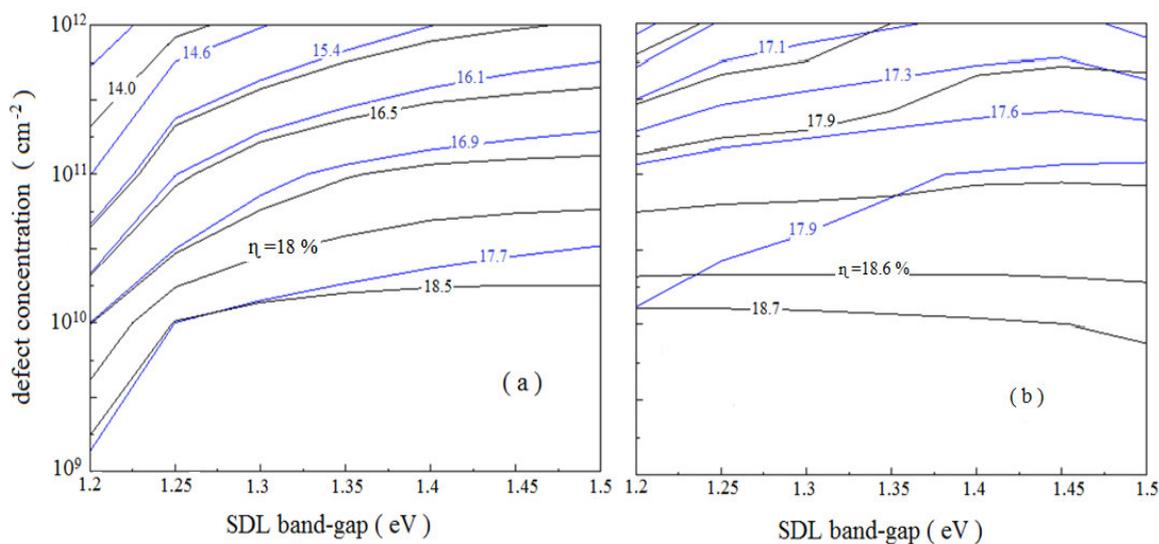


Fig.5. The conversion efficiency of the solar cell as function of the SDL band gap variation and the defect concentration (a) at the SDL/CIGS interface (b) at the CdS/SDL interface. Pinning model (black lines) and doping model (bleu lines).

Increasing the defect concentration beyond 10^{10} cm⁻² the performance drops especially for the pinning model. The pinning model is more sensitive to the variation of the capture cross-sections where the efficiency drops by about 1.2% at the CdS/SDL interface and 4-5% at the SDL/CIGS ones compared to the doping model which shows a decrease of 0.2% for the CdS/SDL interface and between 3 and 3.5% for the SDL/CIGS interface. We conclude from our numerical results that the surface band-gap widening in CIGS photovoltaic absorbers provides a certain tolerance to excess defects at the both junction interfaces where the efficiency increases by about 3% when passed from 1.2 to 1.5 eV.

Acknowledgment

We acknowledge the use of SCAPS-1D program developed by Marc Burgelman and colleagues at the University of Gent in all the simulation reported in the paper.

References

- [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] M.A. Green, Solar cell efficiency tables (version 42), Research and Applications **21**, 827 (2013).
- [5] Y. Yan, K.M. Jones, J. Abushama, M. Young, S. Asher, M.M. Al-Jassim, R. Noufi, Applied Physics Letters **81**,1008 (2002).
- [6] Z. Li, X. Yu-Ming, X. Chuan-Ming, H. Qing, L. F. Fang, L. Chang-Jian, S. Yun, Thin solid Films **520**, 2873 (2012).
- [7] M.J. Romero, K.M. Jones, J. AbuShama, Y. Yan, M.M. Al-Jassim, R. Noufi, Applied Physics Letters **83**, 4731 (2003).
- [8] 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).
- [9] J. Petterson, C. Platzer-bjorkman, U. Zimmermann, M. Edoff, Thin Solid Films **519**, 7476 (2011).
- [10] T. Minemoto, T. Matsui, H. Takakura, Y. Hamakawa, T. Negami, Y. Hashimoto, T. Uenoyama, M. Kitagawa, Solar Energy Materials and Solar cells **67**, 83 (2001).
- [11] 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).
- [14] H. Movla, D. Salami, S.V. Sadreddini, Applied Physics A **109**, 497 (2012).
- [15] M. Burgelman, P. Nollet, S. Degrave, Thin Solid Films **361**, 527 (2000).
- [16] M. Burgelman, P. Nollet, S. Degrave, S. Degrave, P. Nollet, Progress Photovoltaic : Research and Applications **12**, 143 (2004).
- [17] S. J. Fonash, Solar Cell Device Physics, 2nd edition, Academic Press (Elsevier), USA, 2010.
- [18] K. Wyatt, Metzger, Journal of Applied Physics **103**, 094515 (2008).
- [19] A. O. Pudov, Impact of secondary barriers on CuIn_{1-x}GaxSe₂ solar-cell operation [Doctoral thesis]. Colorado state University, 2005.
- [20] M.J. Romero, K.M. Jones, J. Abushama, Y. Yan, M.M. Al-jassim, R. Noufi, Applied Physics Letters **83**, 4731 (2003).
- [21] M. Leon, R. Serna, S. Levcenko, A. Nateprov, A. Nicorici, J.M. Merino, E. Arushanov, physica status solidi **203**, 2913 (2006).