

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET
POPULAIRE**

**MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA
RECHERCHESCIENTIFIQUE**

**UNIVERSITE SAAD DAHLAB –BLIDA 1-
FACULTE DE TECHNOLOGIE
DEPARTEMENT DES ENERGIES RENOUVELABLES**



MEMOIRE

**POUR L'OBTENTION DU DIPLOME DE
MASTER EN ENERGIES RENOUVELABLES**

Option : Conversion Photovoltaïque

THEME :

*L'effet de la couche tampon sur les performances de
la cellule solaire à base de Kësterite*

Présenté par :

ADMANE Amel

LARAB Amira

Soutenu devant le jury composé de :

R. BOUKENOU	MCB	Université de Blida 1	Président
A. BEDIA	MCA	Université de Blida 1	Encadreur
T. DOUMAZ	MAA	Université de Blida 1	Examineur

Année universitaire : 2022 /2023

ملخص

تمت دراسة تأثير الطبقة العازلة على المعلمات الكهربائية للخلايا الشمسية CZTSSe باستخدام محاكي سعة الخلية الشمسية أحادية البعد (SCAPS-1D). تم استخدام CdS , $\text{Cd}_{0.4}\text{Zn}_{0.6}\text{S}$ و ZnSe كطبقات عازلة مختلفة. تمت مقارنة نتائج المحاكاة والتحقق من صحتها مع النتائج التجريبية الفعلية. تمت دراسة تأثير السماكة والمنشطات وطاقة الفجوة في الطبقة الممتصة وتأثير درجة الحرارة. تكشف هذه الدراسة أيضًا أن CdS هي خيار أفضل لتصنيع الطبقة العازلة للخلايا الشمسية CZTSSe. بالإضافة إلى ذلك، تمت محاكاة تأثير عمل الخرج المعدني للاتصال الخلفي على أداء الخلية CZTSSe. يُقترح أن زيادة عمل إخراج المعادن هو حل محتمل لتحسين أداء الخلايا الشمسية CZTSSe.

الكلمات الرئيسية: الخلايا الشمسية، CZTSSe، المحاكاة، SCAPS، طبقة عازلة.

Résumé

L'effet de la couche tampon sur les paramètres électriques de la cellule solaire CZTSSe a été étudié à l'aide du Simulateur de capacité de cellule solaire en une dimension (SCAPS-1D). CdS , $\text{Cd}_{0.4}\text{Zn}_{0.6}\text{S}$ et ZnSe ont été utilisés comme différentes couches tampon. Les résultats de la simulation ont été comparés et validés avec des résultats expérimentaux. L'effet de l'épaisseur, du dopage et de l'énergie de gap de la couche absorbante et ainsi que l'effet de la température ont été étudiés. La présente étude révèle également que le CdS est un meilleur choix pour la fabrication de la couche tampon pour la cellule solaire CZTSSe. De plus, l'effet du travail de sortie du métal du contact arrière sur les performances de la cellule CZTSSe a été simulé. Il est suggéré que l'augmentation du travail de sortie du métal est une solution potentielle pour améliorer les performances de la cellule solaire CZTSSe.

Mots Clés : Cellule solaire, CZTSSe, Simulation, SCAPS, Couche tampon.

Abstract:

The effect of the buffer layer on the electrical parameters of the CZTSSe solar cell was studied using the One-Dimensional Solar Cell Capacity Simulator (SCAPS-1D). CdS , $\text{Cd}_{0.4}\text{Zn}_{0.6}\text{S}$, and ZnSe were used as different buffer layers. The simulation results were compared and validated with experimental results. The effect of the thickness, the doping and the gap energy of the absorber layer and the effect of the temperature were studied. This study also reveals that CdS is a better choice for the manufacture of the buffer layer for the CZTSSe solar cell. In addition, the effect of the metal work function of the back contact on the CZTSSe solar cell performance was simulated. It is suggested that increased metal work function is a potential solution to improve CZTSSe solar cell performance.

Keywords : Solar cell, CZTSSe, simulation, SCAPS, Buffer layer.

Remerciements

Nous tenons tout d'abord à remercier **Allah** le tout puissant et miséricordieux, qui nous a donné la force et la patience d'accomplir ce modeste travail.

Nous tenons à remercier, notre promotrice Dr **BEDIA Asma** qui a su donner de l'ampleur et une orientation plus ambitieuse à notre projet de fin d'études.

Nous lui exprimons notre plus grande gratitude pour l'attention qu'elle nous a consacrée tout au long de cette année et pour son investissement considérable dans ce travail.

Nous tenons à remercier également les membres de jury Dr **BOUKENOUI Rachid**

Et **Mr. DOUMAZ Towfik** pour avoir bien voulu examiner et juger ce travail

Nous adressons aussi nos remerciements à notre porteur de spécialité **Mr. DOUMAZ Towfik** pour tous ses conseils judicieux et ses critiques constructives et surtout sa gentillesse.

Nos sincères remerciements vont à notre chef de département **Dr BOUZAKI Mustapha** pour avoir facilité notre cursus en restant à notre écoute.

On remercie toutes les personnes ayant contribué à la réalisation de ce mémoire.

Ainsi, à tous, nous dirons, qu'à l'origine de grandes réalisations, se trouve non seulement la force de la volonté, mais également la main de l'Éternel le Tout-Puissant.

Dédicace

Avec l'expression de ma reconnaissance, je dédie ce modeste travail à ce qui, quels que soient les termes embrassés, je n'arriverais jamais à leur exprimer mon amour sincère ;

À mon père décédé, qui n'a pu voir mon travail. J'espère que, du monde qui est sien maintenant, il apprécie cet humble geste comme preuve de reconnaissance de la part d'une fille qui a toujours prié pour le salut de son âme. Puisse DIEU le Tout-Puissant l'avoir en sa sainte miséricorde.

À la femme qui a souffert sans me laisser souffrir, qui n'a jamais dit non à mes exigences et qui m'a épargné beaucoup d'effort pour me rendre heureuse ; mon adorable mère NAFAA Nadia.

À l'homme, mon précieux offre de DIEU, qui doit ma vie, ma réussite et tout mon respect ; mon cher père AIT ALI Slimane.

À mes chers frères Houssam et Djihad qui n'ont pas cessé de me conseiller, encourager et soutenir tout au long de mes études. Que DIEU les protège et leurs offre la chance et le bonheur.

À mon adorable petit frère Djaber, qui sait toujours comment procurer la joie et le bonheur pour toute la famille.

À mon oncle Brahim, et mes tantes Nabila et Karima. Que DIEU leur donne une longue et joyeuse vie.

À tous les cousins et les cousines, les voisins et les amis que j'ai connu jusqu'à maintenant. Merci pour leur amour et leurs encouragements.

Sans oublier mon binôme et ma meilleure amie ADMANE Amel, avec laquelle j'ai pris beaucoup de plaisir à travailler. Nous avons formé une belle équipe, je te remercie donc de tout ce que tu m'as porté au cours de ces douze années partagées.

Amira

Dédicace

Du profond de mon cœur je dédie ce travail à tous ceux qui me sont chers

À ma chère mère

Aucune dédicace ne saurait exprimer mon respect, mon amour éternel et ma considération pour les sacrifices que vous avez consenti pour mon instruction et mon bien-être. Je vous remercie pour tout le soutien et l'amour que vous me portez depuis mon enfance et j'espère que votre bénédiction m'accompagne toujours.

À la mémoire de mon père

Ce travail est dédié à mon père décédé qui m'a toujours poussé et motivé dans mes études. J'espère que, du monde qui est sien maintenant, il apprécie cet humble geste comme preuve de reconnaissance de la part d'une fille qui a toujours prié pour le salut de son âme.

Puisse DIEU le Tout-Puissant l'avoir en sa sainte miséricorde.

A Amira

Mon amie partenaire «binôme», envers qui j'exprime toute la satisfaction et la fierté, un binôme par excellence, au temps du point de vue travail que du point de vue humain. Se fut bien plus qu'un plaisir d'être associée à elle dans un projet aussi passionnant. J'exprime une grande gratitude envers sa famille sans qui ce projet n'aurait jamais vu le jour.

À mon frère Hicham et ma sœur Imane

Pour qui je souhaite une longue vie, beaucoup de santé et de bonheur.

A toutes les personnes de ma grande famille, spécialement mon oncle Kamel et son épouse Meriem et leurs enfants Wassim et Assil.

A mes tantes

Qui n'ont pas cessé de m'encourager et me soutenir tout au long de mes études.

À mes amis de toujours,

Maria et Kawtar. Ces êtres dévoués le symbole de l'amitié.

À tous ceux qui m'ont aidé, à tous ceux que j'aime, avec toute ma gratitude, à tous ceux qui me sont chers et dont je n'ai pas citer le nomje dédie ce travail.

Amel

Sommaire

Remerciement	
Dédicaces	
Sommaire	
Liste des figures	
Liste des tableaux	
Liste des symboles.....	
Nomenclature.....	
Résumé	
Introduction générale	1
I.1 Introduction.....	4
I.2 Effet photovoltaïque	4
I.2.1 Rayonnement solaire	5
I.2.2 Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque	6
I.2.3 Caractéristiques électriques et optiques d'une cellule solaire	7
I.2.4 Paramètres par défaut.....	9
I.3 Cellules photovoltaïques en couches minces.....	10
I.4 Etat de l'art de la cellule photovoltaïque en couche mince à base de CZTSSe	9
I.4.1 Avantages du CZT(S,Se)	10
I.4.2 Propriétés cristallographiques	11
I.4.3 Propriétés opto-électroniques	12
I.4.4 Cellules solaires à base de CZT(S,Se)	12
I.4.5 Fabrication d'une cellule solaire à base de CZTSSe	13
I.5 Dopage et défautsde CZTSSe.....	15
I.6 Performances d'une cellule solaire à base de CZTSSe.....	16
I.7 Conclusion	17

II.1 Introduction	18
II.2 Équations fondamentales dans les semi-conducteurs.....	18
II.2.1 Équation de Poisson	18
II.2.2 Équations de continuité.....	18
II.3 Phénomènes de recombinaison.....	19
II.3.1 Recombinaison radiative.....	19
II.3.2 Recombinaison Auger	20
II.3.3 La recombinaison Shockley Read Hall (SRH)	21
II.4 Logiciel SCAPS	22
II.4.1 Choix de la cellule solaire.....	24
II.4.2 Propriétés des couches	25
II.4.3 Résultat de la simulation (Caractéristique J(V))	25
II.5 Présentation de la structure de la cellule solaire CZTSSe.....	26
II.6 Paramètres de simulation de la cellule solaire CZTSSe	26
II.6.1 Contacts et Résistances	26
II.6.2 Paramètres des couches de la cellule solaire	27
II.6.3 Défauts	25
II.7 Conclusion.....	28
III.1 Introduction.....	30
III.2 Simulation de la cellule solaire à base de CZTSSe de référence.....	30
III.3 Performances de la cellule solaire CZTSSe avec différentes couches tampons	31
III.4 Effet de la coucheabsorbante CZTSSe sur les performances de la cellule solaire ...	32
III.4.1 Effet du dopage de la coucheabsorbante en CZTSSe	32
III.4.2 Effet de l'épaisseur de la couche absorbante en CZTSSe	34
III.4.3 Effet de l'énergie de gap de la coucheabsorbante en CZTSSe	37
III.5 Caractéristiques J(V) des cellules solaires en CZTSSe optimales	39

III.6 Effet du contact arrière sur les performances de la cellule solaire enCZTSSe	40
III.7 Effet de la température	41
III.8 Conclusion	43
Conclusion generale.....	42
References.....	43

Liste des figures

Figure I.1 : Effet Photovoltaïque	04
Figure I.2 : Représentation du spectre solaire.....	05
Figure I.3 : Principe de fonctionnement d'une cellule solaire.....	06
Figure I.4 : Caractéristiques d'une cellule photovoltaïque.....	07
Figure I.5 : Modèle de la cellule d'une diode.....	09
Figure I.6: Structures cristallines de $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}, \text{Se})_4$: (a) K�sterite (b) Stannite.....	11
Figure I.7 : Structure standard d'une cellule solaire en couches minces � h�t�rojonction des structure chalcopyrite.....	13
Figure I.8 : Courbe de J-V de cellule solaire CZTSSe certifi�e de record mondial par Newport d'efficacit� 12.6%.....	16
Figure II.1 : Recombinaison radiative d'un �lectron de la bande de conduction avec un trou de la bande de valence.....	19
Figure II.2 : Exemple de recombinaison Auger.....	20
Figure II.3 : Sch�ma repr�sentatif du ph�nom�ne de la recombinaison SRH.....	21
Figure II.4 : Panneau de d�marrage de SCAPS, le panneau d'action ou principal.....	23
Figure II.5 : D�finition de la structure d'une cellule solaire.....	24
Figure II.6 : Param�tres d'une couche (absorbeur CZTSSe) d'une cellule.....	25
Figure II.7 : Panneau d'affichage des courbes J-V en �clairnement.....	25
Figure II.8 : Sch�ma simplifi� d'une cellule solaire en couches minces en CZTSSe.....	26
Figure III.1 : Caract�ristique J(V) de la cellule solaire � base de CZTSSe.....	30
Figure III.2 : Caract�ristique J(V) de la cellule solaire � base de CZTSSe pour les trois couches tampons.....	31
Figure III.3 : Influence du dopage NA de la couche d'absorbeur CZTSSe sur les param�tr�s externes : (a) V_{co} , (b) J_{cc} , (c) FF et (d) η	33

Figure III.4 : Influence de l'épaisseur de la couche d'absorbeur CZTSSe sur les paramètres externes : (a) V_{co} (b) J_{cc} (c), FF et (d) η.....	35
Figure III.5 : Influence de l'énergie de gap de la couche d'absorbeur CZTSSe sur les paramètres externes : (a) V_{co}, (b) J_{cc}, (c) FF et(d)η	37
Figure III.6 : Caractéristiques J(V) de la cellule solaire à base de CZTSSe pour les trois couches tampons après l'optimisation.....	39
Figure III.7 : Effet du travail de sortie du contact arrière sur les paramètres externes : (a)V_{co}, (b) J_{cc}, (c)FF et (d) η.....	40
Figure III.8 : Effet de la température sur les caractéristiques J(V) de la cellule solaire à base de CZTSSe pour différentes couches tampon: (a)CdS, (b)ZnSe, (c)Cd_{0.4}Zn_{0.6}.....	41
Figure III.9 : Effet de la température sur les paramètres de la cellule solaire CZTSSe pour les trois couches tampons: (a)CdS, (b)ZnSe, (c) Cd_{0.4}Zn_{0.6}S.....	42

Liste des tableaux

Tableau I.1 : Différentes couches tampons que l'on peut trouver dans la littérature.....	15
Tableau II.1 : Paramètres électriques des contacts utilisés dans la simulation.....	26
Tableau II.2 : Paramètres des différents matériaux utilisés dans la simulation.....	27
Tableau II.3 : Paramètres de la densité de défauts des matériaux.....	28
Tableau III.1 : Paramètres électriques de la cellule solaire à base de CZTSSe simulée et de la cellule solaire à base de CZTSSe de record mondial certifiée par Newport.....	31
Tableau III.2 : Paramètres électriques de la cellule solaire à base de CZTSSe pour différentes couches tampons simulée et de la cellule solaire à base de CZTSSe de record mondial certifiée par Newport.....	32
Tableau III.3 : Paramètres optimaux des trois structures pour des valeurs de dopage autour de 10^{16} cm^{-3}	34
Tableau III.4 : Paramètres optimaux des trois structures pour des valeurs de l'épaisseur de $2.5\mu\text{m}$.....	36
Tableau III.5 : Paramètres optimaux des trois structures pour des valeurs d'énergie de gap de 1.1 eV.....	38
Tableau III.6: Paramètres optimaux des trois structures.....	38
Tableau III.7 : Paramètres optimaux des trois structures avant et après optimisation... 	39

Liste –des-symboles

Symbole	Signification	Unité
A	Défauts de type donneur	
AM	Masse d'air	Watt.m⁻²
AM1	Conditions hors atmosphère	Watt.m⁻²
AM1.5	Spectre de la lumière solaire	Watt.m⁻²
Bv	Bande de valence	
Bc	Bande de conduction	
C	Largeur de distribution	
Cn/ Cp	Coefficients Auger pour les électrons et les trous	
D	Défauts de type donneur	
d	Epaisseur	µm
EA(D)	Paramètres de maille	
Eg	Energie de bande interdite	eV
FF	Facteur de forme	%
Jn	Densité de courant des électrons	mA/cm⁻²
Jp	Densité de courant des trous	mA/cm⁻²
Jcc	Densité du courant de court-circuit	mA/cm⁻²
I	Courant de la cellule	A
Icc	Courant de court-circuit	A
Iph	Photo-courant	A
Gn	Taux de génération pour les électrons	
Gp	Taux de génération pour les trous	
K_B	Constante de Boltzmann [1.38.10⁻²³]	m².Kg. s⁻²K⁻¹
n, p	Concentration des électrons et des trous respectivement	cm⁻³
Na, Nd	Concentration des atomes accepteurs et des atomes donneurs respectivement	cm⁻³
Nth	Concentration de défauts	
Nv	Densité d'état dans la bande de valence	cm⁻³
Nc	Densité d'état dans la bande de conduction	cm⁻³
P_{inc}	Puissance incidente	Watt

Pm	Puissance maximale	Watt
q	Charge d'électron [1.602.10⁻¹⁹]	C
Rs	Résistance série	Ω
Rsh	Résistance parallèle	Ω
Rn	Taux de recombinaison pour les électrons	cm⁻³
Rp	Taux de recombinaison pour les trous	cm⁻³
T	Température	K
Vn	Vitesse thermique des électrons	m/s
Vp	Vitesse thermique des trous	m/s
Vco	Tension de circuit ouvert	V
Wd	Energie de crête gaussienne	
Θ	Angle que fait le soleil avec son zénith	°
λ	Longueur d'onde électromagnétique associée au photon	m
α	Coefficient d'absorption	cm⁻¹
Ψ	Potentiel électrostatique	V
ε	Permittivité	[H/m]
η	Rendement	%
εr	Permittivité relative	[H/m]
χ	Affinité électronique	(kJ/mol)
μn	Mobilité des électrons	(cm² V⁻¹ s⁻¹)
μp	Mobilité de trous	(cm² V⁻¹ s⁻¹)
σn(p)	Fraction piégée	
τ	Durée de vie	Km/h
Δn (p)	Densité d'électrons (de trous) en excès	cm⁻³

Nomenclatures

	Signification
Au	Or
Al	Aluminium
Ag	Argent
CZTS	Cuivre, Zinc, Étain, Soufre(Cu₂ZnSnS₄)
CZTSe	Cuivre, Zinc, Etain, Sélénium
CZTSSe	Cuivre, Zinc, Etain, Soufre, Sélénium (Cu₂ZnSn(S, Se)₄)
CdS	Sulfure de Cadmium
CIGS	Di-sélénium de galium d'indium de cuivre (Cu (In, Ga) Se₂)
CdTe	Tellure de Cadmium
Cu	Cuivre
Co	Cobalt
Ir	Iridium
ITO	Oxide d'Indium-Etain
GaAs	Arséniure de Gallium
Mo	Molybdenum
Ni	Nickel
Os	Osmium
Pd	Palladium
Pt	Platinum
Re	Rhenium
Si	Silicium
SRH	Shockley-Read-Hall
Sn	Etain
TCO	Oxyde Conducteur Transparent
W	Tungstène
Zn	Zinc
ZnO	Oxyde de Zinc
ZnSe	Séléniure de Zinc

Introduction Générale

Introduction générale

L'énergie est répertoriée comme la priorité absolue de l'humanité dans les prochaines années ; elle est largement utilisée dans l'industrie, le transport, la communication et la vie quotidienne. Elle se présente sous de nombreuses formes et se divise en deux grandes catégories. La première catégorie est celle des sources d'énergie dites non renouvelables dérivées du charbon, du gaz naturel, du pétrole et de l'uranium. La seconde est celle des énergies dites renouvelables telles que l'éolien, la biomasse, la géothermie, l'hydroélectricité, le solaire thermique et le photovoltaïque.

Parmi les sources d'énergie renouvelables, l'énergie solaire photovoltaïque (PV) est la seule source d'énergie capable de fournir de l'énergie allant des milliwatts aux mégawatts grâce à la technologie modulaire. Elle est également élégante, sans pollution, silencieuse et sans pièces rotatives. Cette énergie est générée par la conversion directe du rayonnement solaire à l'aide de cellules solaires photovoltaïques, «C'est l'effet photovoltaïque ».

Selon leur technologie de fabrication, les cellules solaires photovoltaïques se subdivisent en trois générations. La première génération basée sur l'utilisation des cellules solaire à base de silicium, la deuxième génération où la technologie photovoltaïque dite couches minces. Les systèmes courants de troisième génération comprennent les cellules multicouches en silicium amorphe ou en arséniure de gallium.

Le domaine de la technologie des couches minces est considérablement développé ces dernières années. Des différents types de matériaux (par exemple CdTe, CIGS, CIS) ont été développés par les chercheurs pour obtenir des cellules solaires à couches minces peu coûteuses et à haut rendement [1]. Cependant, le CIGS et le CdTe sont composés d'éléments rares, coûteux (par exemple In, Ga, Te) et d'éléments toxiques (par exemple Cd) [1]. Il est donc nécessaire d'explorer de nouveaux absorbeurs de cellules. Le sulfure de cuivre-zinc-étain-sélénium $Cu_2ZnSn(S, Se)_4$ (CZTSSe) est le matériau le plus approprié pour remplacer le CIGS et le CdTe, car il est basé uniquement sur des éléments abondants, non toxiques et bon marché.

Les métaux qui composent le CZTSSe sont 25 à 400 fois moins chers que l'indium ou le gallium [1]. L'abondance et le faible coût des métaux (cuivre, zinc et étain) qui composent le CZTSSe en font un matériau très intéressant pour la conversion photovoltaïque. Un record mondial pour les absorbeurs CZTSSe a atteint 12,6%, ce qui est prometteur mais encore insuffisant pour prédire le développement de l'industrie [2].

Introduction générale

Le but de cette étude est d'étudier l'effet des couches tampons en vue d'améliorer les performances des cellules solaires CZTSSe et en choisir le meilleur. Ce travail est réalisé à l'aide d'outils de simulation permettant d'étudier divers paramètres affectant les performances des cellules solaires.

Les simulations sont réalisées à l'aide du logiciel Solar Cell Capacitance Simulator one dimension (SCAPS1-D).

Ce manuscrit est organisé en trois chapitres :

- Le premier chapitre est une étude bibliographique concernant les cellules photovoltaïques à base de CZTSSe.
- Dans le deuxième chapitre, nous présentons le logiciel de simulation SCAPS et la structure de la cellule solaire étudiée.
- Dans le troisième chapitre, nous présentons les résultats de la simulation et leurs interprétations.

Nous terminons ce manuscrit par une conclusion générale qui met l'accent sur les principaux résultats obtenus.

Chapitre I

*Cellule photovoltaïque en couche mince à
base de CZTSSe*

I.1 Introduction

L'énergie solaire est une ressource inépuisable à l'échelle humaine. Cette énergie est convertie en énergie électrique par des appareils électroniques, appelés « cellule photovoltaïque ».

Dans ce chapitre, nous allons aborder les concepts de base dans le domaine du photovoltaïque.

I.2 Effet photovoltaïque

Le mot photovoltaïque est composé de deux parties : le préfixe « photo », qui est un dérivé du mot grec désignant « lumière » ou « clarté », et le suffixe « volt », relatif au pionnier de l'électricité Alessandro VOLTA.

L'effet photovoltaïque a été découvert en 1839 par Alexandre Edmond Becquerel. L'effet photovoltaïque est obtenu par la génération de tension par l'absorption de photons par des matériaux semi-conducteurs (figure I.1). Les cellules photovoltaïques génèrent du courant continu à partir du rayonnement solaire, qui peut être utilisé pour alimenter des appareils ou charger des batteries [3].

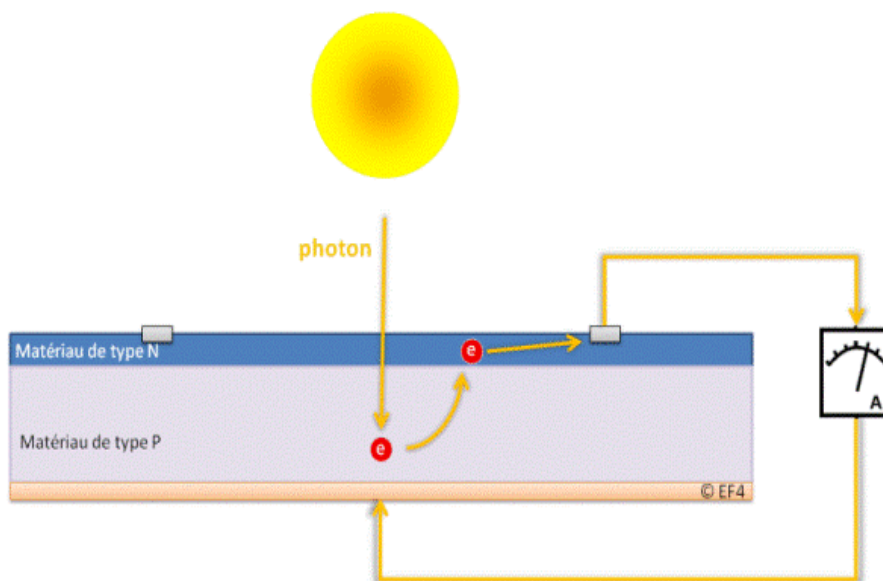


Figure I.1 : Effet Photovoltaïque [3].

I.2.1 Rayonnement solaire

Le rayonnement solaire est l'ensemble des ondes électromagnétiques émises par le soleil. Pour tenir compte de l'épaisseur d'atmosphère traversée par le rayonnement solaire incident, on introduit un coefficient appelé nombre de masse (AM) défini par :

$$AM = 1/\cos(\theta) \quad (I.1)$$

Où θ est l'angle que fait le soleil avec son zénith. Par définition, AM1 correspond aux conditions hors atmosphère.

Au sol, le rayonnement solaire a au moins deux composantes : une composante directe et une composante diffusée (rayonnement incident diffusé ou réfléchi par un obstacle : nuages, sol) formant le rayonnement global [1].

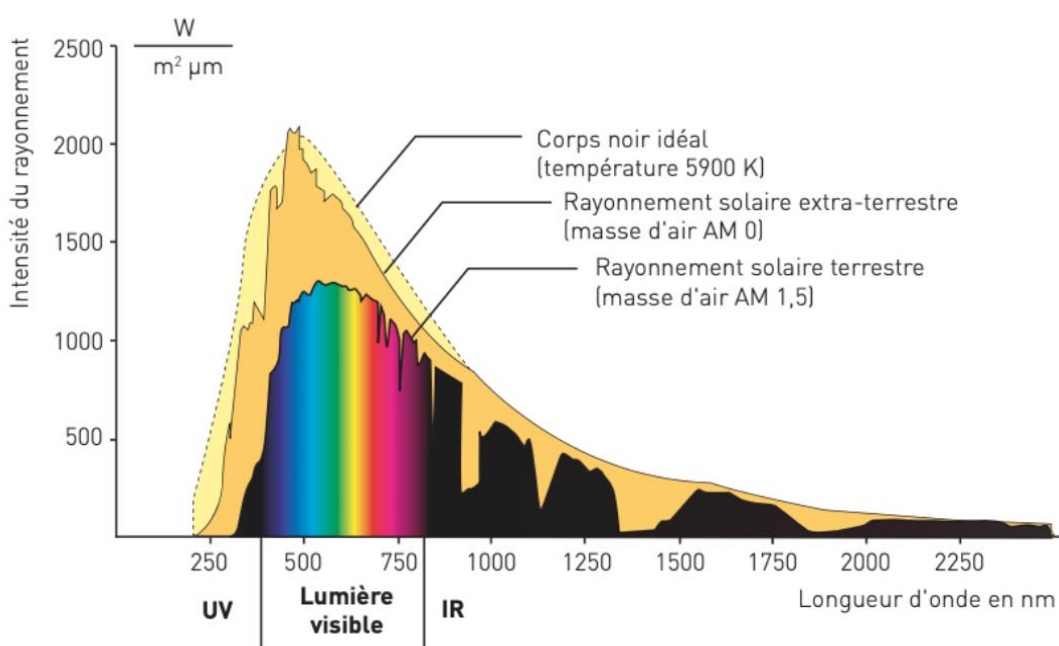


Figure I.2 : Représentation du spectre solaire[4]

La distribution en énergie de la répartition spectrale du rayonnement solaire extraterrestre est répartie comme il est indiqué sur la figure I.2.

I.2.2 Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque

Le principe de la cellule solaire est de convertir l'énergie solaire (rayonnement) instantanément en une énergie électrique. Cette conversion est possible grâce aux propriétés électriques du semi-conducteur.

Les premières cellules solaires sont basées sur l'utilisation du silicium comme élément principale du semi-conducteur. La cellule devient un générateur de courant continu [5].

L'effet photoélectrique consiste à l'apparition d'une différence de potentiels produite par la génération de porteurs de charge par excitation lumineuse au voisinage d'une jonction. La cellule solaire est une jonction p-n dont le fonctionnement est basé sur l'absorption du flux lumineux solaire [5].

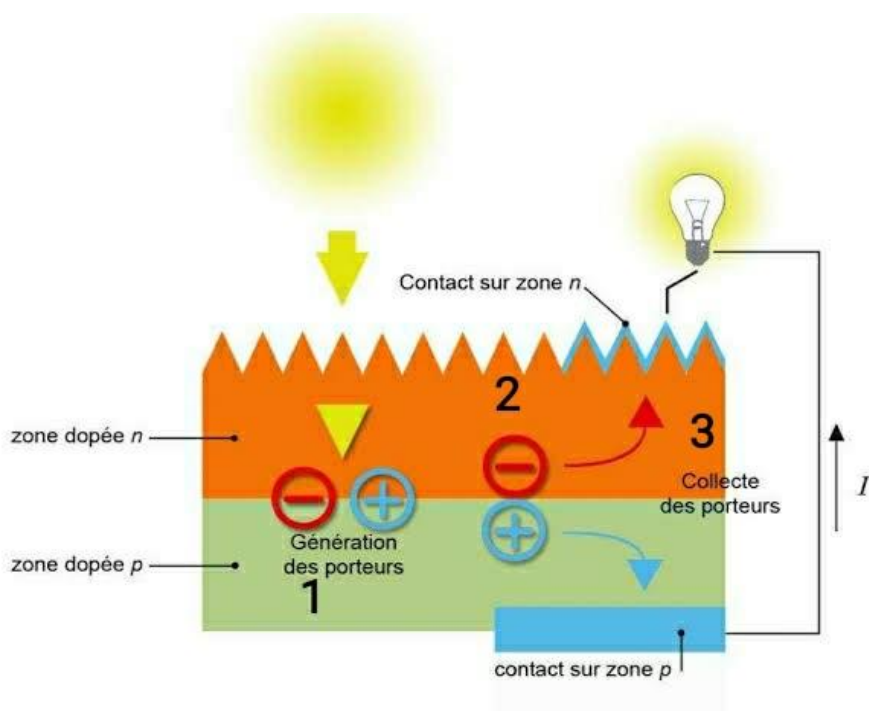


Figure I.3 : Principe de fonctionnement d'une cellule solaire [6].

La cellule solaire remplit trois fonctions qui sont schématisées dans la figure ci-dessus [7] :

1. Absorption des photons du rayonnement incident ayant une énergie égale ou supérieure à la largeur de la bande interdite et génération des paires électron-trou.
2. Le déplacement des porteurs de charges, ensuite la séparation de ces porteurs : Les paires électron-trou doivent se séparer sinon leur recombinaison est automatique et rapide libérant un phonon, selon l'énergie absorbée, et un photon.
3. Collection de ces porteurs dans un circuit extérieur.

I.2.3 Caractéristiques électriques et optiques d'une cellule solaire

Le tracé de la caractéristique $I(V)$ de la cellule solaire 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 de la caractéristique est la même que celle d'une diode simple, et sous éclairement, la courbe est décalée vers le bas d'une valeur égale au photo-courant I_{ph} . I_{cc} et V_{co} , sont respectivement le courant de court-circuit et la tension en circuit ouvert [1].

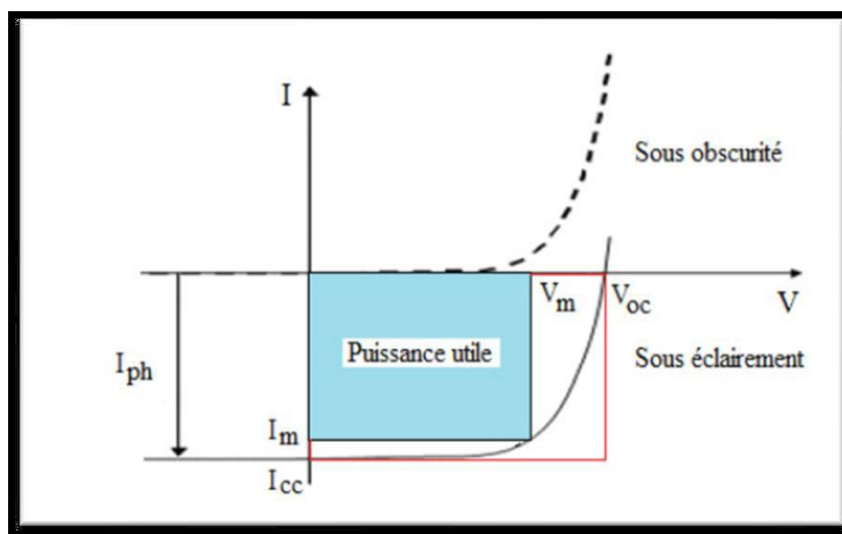


Figure I.4 : Caractéristique d'une cellule photovoltaïque [8].

I.2.3.1 Tension en circuit ouvert (V_{co})

Le premier paramètre caractéristique d'une cellule PV est la tension en circuit ouvert (V_{co}). Le V_{co} est la tension maximale que peut générer la cellule. Celle-ci se mesure lorsque le courant est nul [9].

$$V_{co} = \frac{K_B T}{q} \ln \left(\frac{I_{cc}}{I_0} + 1 \right) \quad (I.2)$$

Ou :

K_B : Constante de Boltzmann [$1.38 \cdot 10^{-23} \text{m}^2 \cdot \text{Kg} \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$]

q : Charge d'électron [$1.602 \cdot 10^{-19} \text{C}$]

I_{cc} : Courant de court-circuit

I₀ : Courant de saturation

T : Température

I.2.3.2 Courant de court-circuit (I_{cc})

Il est obtenu en court-circuitant les bornes de la cellule ($V=0$). Il correspond au photocourant I_{ph} généré par le rayonnement. Pour une distribution spectrale donnée, ce photocourant augmente 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 [8].

I.2.3.3 Facteur de forme (FF)

Le facteur de forme permet de qualifier la qualité de la cellule PV. C'est le rapport entre la puissance maximale P_m fournie par la cellule sur le produit de $V_{co} \times I_{cc}$. Ce rapport doit avoir une valeur la plus proche possible de 1 [9].

$$FF = \frac{P_m}{V_{co} \cdot I_{cc}} = \frac{I_m \cdot V_m}{V_{co} \cdot I_{cc}} \quad (I.3)$$

Ou :

P_m : Puissance maximale

I_m : Courant maximale

V_m : Tension maximale

I.2.3.4 Rendement photovoltaïque

C'est le paramètre le plus important puisqu'il permet d'évaluer les performances de la cellule PV [9]. C'est le rapport entre la puissance générée par la cellule (P_m) et la puissance incidente (P_{in}) du rayonnement lumineux éclairant la cellule. Il est défini par la relation suivante :

$$\eta = \frac{P_m}{P_{in}} \quad (I.4)$$

Ou:

η : Rendement

P_m : Puissance maximale

P_{in} : Puissance incidente

I.2.4 Paramètres par défaut

Une cellule photovoltaïque n'est jamais parfaite. Le schéma de base équivalent d'une cellule solaire photovoltaïque tenant en compte les résistances séries R_s et parallèles R_{sh} est illustré sur la (figure I.5).

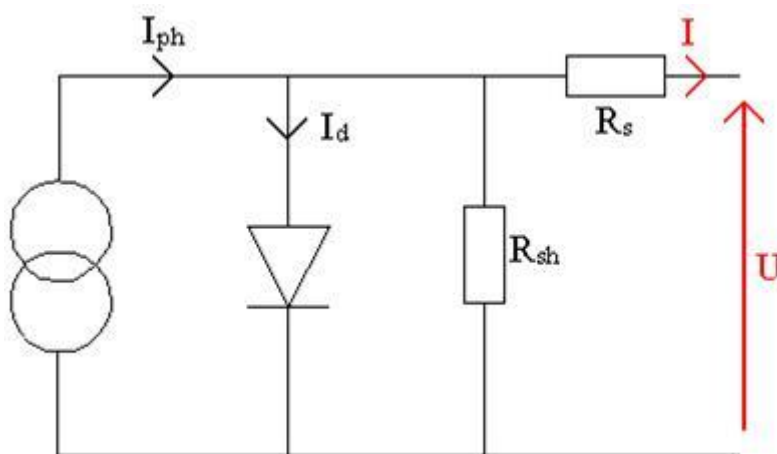


Figure I.5 : Modèle de circuit électrique équivalent d'une cellule solaire incluant les résistances parasites.

I.2.4.1 Résistance en série R_s

Elle est liée à l'impédance des électrodes et du matériau, il en résulte que la tension « V » aux bornes de la cellule est différente de la tension « V » aux bornes de la jonction pn. Ce

terme doit idéalement être le plus faible possible pour limiter son influence sur le courant de la cellule [1].

I.2.4.2 Résistance en parallèle R_{sh}

Correspond à une résistance de fuite entre les deux zones n et p de la jonction ; il en résulte qu'une partie du courant I_{ph} sera dérivée par cette résistance et ne pourra être délivrée à la charge. Cette résistance devra être la plus élevée possible [9].

I.3 Les cellules photovoltaïques en couches minces

On appelle une couche mince un matériau dont l'une des dimensions, en général l'épaisseur, est très petite devant les deux autres dimensions de telle sorte qu'elle varie de quelques "nm" à quelques " μm " (typiquement ce sont des couches de 10 à 100 nanomètres d'épaisseur). Cette faible distance entre les deux surfaces limites du matériau entraîne une perturbation des propriétés physique, selon cette dimension très souvent un tel petit nombre de couches atomiques possède des propriétés très différentes [10].

Les cellules solaires en couches minces, souvent désignées comme cellules de deuxième génération, regroupent la filière du silicium amorphe, celle du CdTe (tellure de cadmium) et celle, notée CIGSe, à base d'alliages Cu (In, Ga)Se₂ (diséléniure de cuivre, d'indium et de gallium). L'intérêt de ces filières réside dans la faible quantité de matériaux requis et l'utilisation de procédés d'élaboration compatibles avec des grandes surfaces sur tout type de substrat souple ou rigide ; avec à la clé, une réduction des coûts de production. En effet, ces matériaux sont beaucoup plus absorbants que le silicium* cristallin (avec des coefficients d'absorption jusqu'à 100 fois supérieurs) et ne nécessitent donc que quelques microns d'épaisseur (contre $\sim 200 \mu\text{m}$ pour le silicium cristallin) pour absorber tous les photons d'énergie supérieure au gap.

I.4 Etat de l'art de la cellule photovoltaïque en couche mince à base de CZTSSe

I.4.1 Avantages du CZT(S,Se)

La couche CZTSSe présente plusieurs avantages, notamment [11] :

-C'est un composé où les défauts intrinsèques conduisent généralement à un semi-conducteur de type p.

- Les productions de zinc et d'étain sont respectivement 20000 et 500 fois supérieures à celle de l'indium.

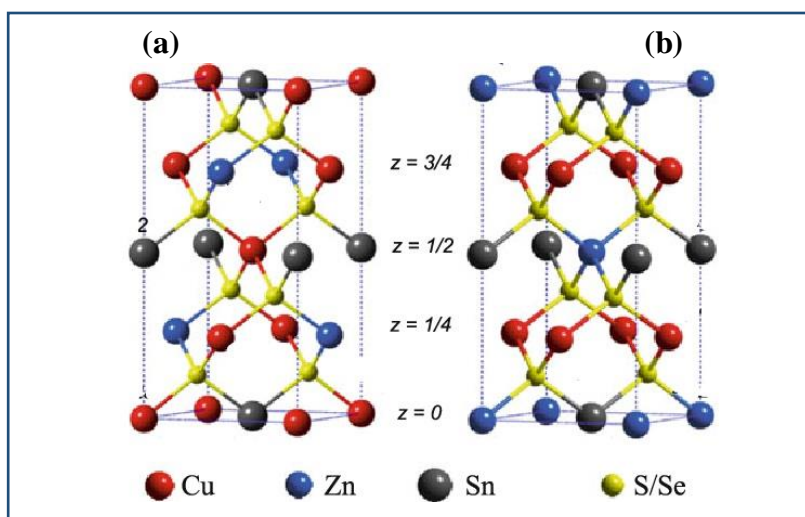
- L'architecture d'une cellule solaire à base de CZT(S, Se) peut être la même que celle des cellules CIGS. Des rendements de 12,6% ont été obtenus avec ce type de cellules solaires (couche tampon en CdS et fenêtre en ZnO). Cependant, pour atteindre des rendements élevés, un ajustement des couches tampons et couches fenêtres sera probablement nécessaire.

I.4.2 Propriétés cristallographiques

Le $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S},\text{Se})_4$ cristallise généralement dans la structure Kësterite ou la structure Stannite. Comme la montre la (figure I.6), il s'agit dans les deux cas d'une maille quadratique centrée. La Kësterite est considérée comme étant la maille la plus stable. (Ces paramètres de maille sont $a=0.54\text{nm}$ et $c=1.09\text{ nm}$).

Les structures Kësterite et Stannite diffèrent par les séquences d'empilements des cations sur l'axe 'c'[12].

Il est très probable d'avoir les deux types de structures dans un matériau car leurs énergies de formation différentes très peu (environ 3 meV par atome).La structure kësterite est celle qui aurait l'énergie la plus basse et serait donc la plus stable [13].



La structure cristalline du CZTSSe est composée de l'alternance de deux plans cationiques le long de l'axe 'c' de la maille :

- Les plans de Cu et Sn situés à $z=0$ et $z=1/2$.
- Les plans de Cu et Zn situés à $z=1/4$ et $z=3/4$.

I.4.3 Propriétés opto-électroniques

L'énergie de bande interdite vaut 1,0 eV pour le CZTSe pur tandis que celle du CZTS pur est de 1,5 eV. Elle varie entre ces deux valeurs pour le CZTSSe et peut être modulée grâce au taux du soufre et du sélénium dans le matériau [14]. C'est un matériau à gap direct avec un coefficient d'absorption élevé supérieur à 10^4cm^{-1} [16]. Il est naturellement dopé p, un tel comportement est causé par la formation de défauts intrinsèques qui risquent de se former pendant la synthèse ou la croissance cristalline.

On constate que, les couches minces de CZTSSe ont de bonnes propriétés optiques mais elles sont toujours gouvernées par les conditions de préparation. Les principaux paramètres influents sur la valeur du gap dans les structures Kesterites sont [1] :

- La température.
- L'épaisseur de la couche.
- La composition de la couche.

I.4.4 Cellules solaires à base de CZT(S,Se)

Les cellules solaires à base de CZT(S, Se) sont similaires aux cellules à base de CIGS. L'architecture est généralement la suivante : verre sodocalcique / Mo / CZT(S, Se) / CdS / ZnO / ZnO : Al. La théorie a montré que le CdS a un décalage de bande adéquat pour le CZTSSe [17], et jusqu'à maintenant, les cellules solaires dont les rendements de conversion sont les meilleurs, ont été obtenues avec une couche tampon de CdS. Le contact arrière est également un paramètre important, les métaux avec des travaux de sortie supérieurs au Mo, tel que Au, Ni ou W pourraient améliorer le V_{co} [18].

La jonction PN est ainsi formée d'une couche CZT (S, Se) de type p et d'une couche tampon CdS (semi-conducteur de type n). Si les deux semi-conducteurs sont des matériaux différents on parle d'hétérojonction.

I.4.5 Fabrication d'une cellule solaire à base de CZTSSe

Une cellule solaire est constituée d'un ensemble de couches minces semi-conductrices avec une épaisseur totale d'environ 5 μm . La structure de la cellule photovoltaïque à base de CZTSSe synthétisées au laboratoire est représentée dans la (figure I.7) [19].

Le substrat de ce composant électronique est en verre. La première étape de fabrication d'une cellule photovoltaïque est le dépôt d'une couche de molybdène ou d'ITO de 1 μm d'épaisseur, généralement par la technique d'évaporation thermique ou par pulvérisation cathodique. Cette couche constitue le contact ohmique arrière de la cellule, elle assure l'adhésion entre la couche active de la cellule (la couche absorbante) et le substrat.

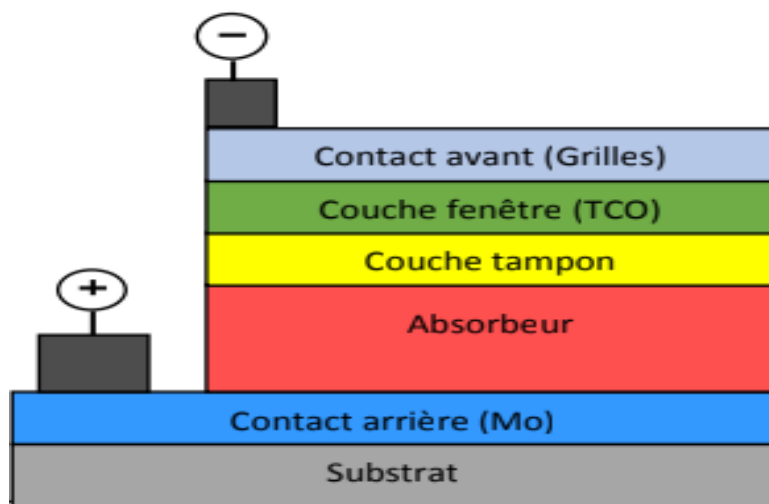


Figure I.7: Structure standard d'une cellule solaire en couches minces à hétérojonction [20].

I.4.5.1 Substrat

Le plus utilisé est une couche de verre sodé, ainsi que des substrats flexibles ou métalliques sont utilisés, d'épaisseur allant de 1 à 3 mm [1].

I.4.5.2 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, l'Or, l'Aluminium, l'Argent et le Cuivre. Parmi ces métaux, le Molybdène qui est le plus couramment utilisé comme contact arrière des cellules solaires CZTSSe. Son épaisseur est d'environ $1 \mu\text{m}$ [1].

I.4.5.3 Couche absorbante

C'est la couche la plus importante dans la cellule photovoltaïque car elle est responsable de l'absorption des rayonnements solaires ainsi que la génération des porteurs de charges (les électrons et les trous) [2]. Elle est souvent composée d'un semi-conducteur de type p et d'une épaisseur de 1 à 3 μm et doit être caractérisée par [21] :

1. Un grand coefficient d'absorption dans le domaine du visible ($> 10^4 \text{ cm}^{-1}$).
2. Une bande interdite directe d'une largeur de l'ordre de 1.1-1.7 eV.
3. Une conductivité de l'ordre de $10^{-2} (\Omega \cdot \text{cm})^{-1}$.

I.4.5.4 Couche tampon

La couche tampon est une couche située entre la couche absorbante et la couche d'oxyde transparent conducteur (TCO). Le TCO est directement réalisé, une jonction photovoltaïque peut exister, mais son rendement sera limité par :

- L'inadaptation des bandes interdites ;
- Les courants de fuite dus à la présence de zones désordonnées aux joints de grains.

De ce fait, Il est préférable d'introduire une fine couche (10-50 nm), dite couche tampon (ou fenêtre optique), entre les deux composés (une jonction semi-conducteur absorbant/oxyde) pour optimiser les performances de la cellule solaire. Elle doit être caractérisée par [21] :

1. Un gap d'une valeur comprise entre 2.4 et 3.2 eV permettant une transition souple entre la bande interdite de la couche absorbante et celle de la couche d'oxyde transparent conducteur.
2. Une morphologie très homogène afin d'éviter tout effet de court-circuit au niveau des joints de grains.

Les différentes couches tampon quant on peut trouver dans la littérature sont présentées dans le (tableau I.1) :

Tableau I.1 : Différentes couches tampon quant on peut trouver dans la littérature [22].

Matériaux	Bande interdite (eV)	Affinité électronique (eV)
ZnO	3.3	4
ZnS	3.8	3.9
ZnSe	2.7	-----
MgO	7.7	-----
CdS	2.4	3.8

I.4.5.5 Couche d'oxyde transparent conducteur (TCO)

La couche d'oxyde transparent conducteur (TCO) doit être simultanément transparente et conductrice. Dans le domaine du spectre solaire, la transmission des couches doit être supérieure à 80 %. La conductivité de ces couches doit être supérieure à 10^3 ($\Omega \text{ cm}^{-1}$).

De telles propriétés sont obtenues en utilisant des couches minces de SnO_2 , In_2O_3 , de leur alliage ITO et de ZnO. Leur transparence est liée à la valeur de leur bande interdite, tandis que, leurs propriétés électriques dépendent de la composition des couches et d'un éventuel dopage. On dépose généralement une première couche non dopée de ZnO, puis une couche dopée de ZnO : Al ou d'ITO. En effet, la couche de ZnO intrinsèque, donc non-conductrice, évite toute fuite de courant entre la couche absorbante et le contact supérieur. Il a été montré que cette couche pouvait être évitée si l'on déposait une couche tampon (CdS par exemple) plus épaisse [21].

I.5 Dopage et défauts de CZTSSe

CZTSSe est un matériau auto-dopé (intrinsèquement dopé), qui signifie que, lorsque le composé est formé, il devient automatiquement dopé. Le CZTSSe utilisé dans les cellules solaires est de type p. Ce dopage est dû à la présence de défauts cristallins générant des états accepteurs (dopage intrinsèque). Les états accepteurs sont principalement dus aux lacunes de cuivre et les anti-sites de cuivre-sur-Zinc (CuZn) [23]. C'est donc l'abondance de ce dernier défaut dans le CZTSSe qui est à l'origine de son dopage p.

I.6 Performances d'une cellule solaire à base de CZTSSe

La première cellule solaire à base de CZTSSe a été signalée en 1997 par Katagiri et al.[24]. Ils ont construit la première cellule solaire à base de CZTS pur (0.66% de rendement) où l'absorbeur CZTS est dans une hétérojonction avec la couche tampon de CdS, la couche de TCO est à base de ZnO : Al et Mo est le contact arrière. L'absorbeur CZTS a été préparé par sulfuration. Dans la même année, Friedlmeier et al. ont fabriqué des cellules solaires à base des couches de CZTSSe, avec un rendement de 0.6% [24]. Katagiri et al. ont établi un nouveau record de rendement de 2.62% par le procédé de sulfuration en deux étapes à partir des précurseurs déposés sous vide [25].

Le rendement est augmenté lorsqu'ils ont optimisé le procédé de sulfuration (5.4% de rendement) [26]. En 2009, l'efficacité des cellules solaires à base CZTSSe avait augmenté à 3.2% [26]. Ce rendement s'est amélioré par la réalisation d'alliage formé par CZTSSe. Au sein d'IBM, Mitzi et al.[2] ont fabriqué des cellules solaires à base de CZTSSe avec un rendement 9.7%. Le dernier résultat annoncé par IBM en 2014, l'efficacité des cellules solaires CZTSSe est fixée à 12.6% [2]. La courbe de J-V de cellule solaire CZTSSe certifiée de record mondial par Newport de rendement de 12.6% est présentée par (la figure I.8).

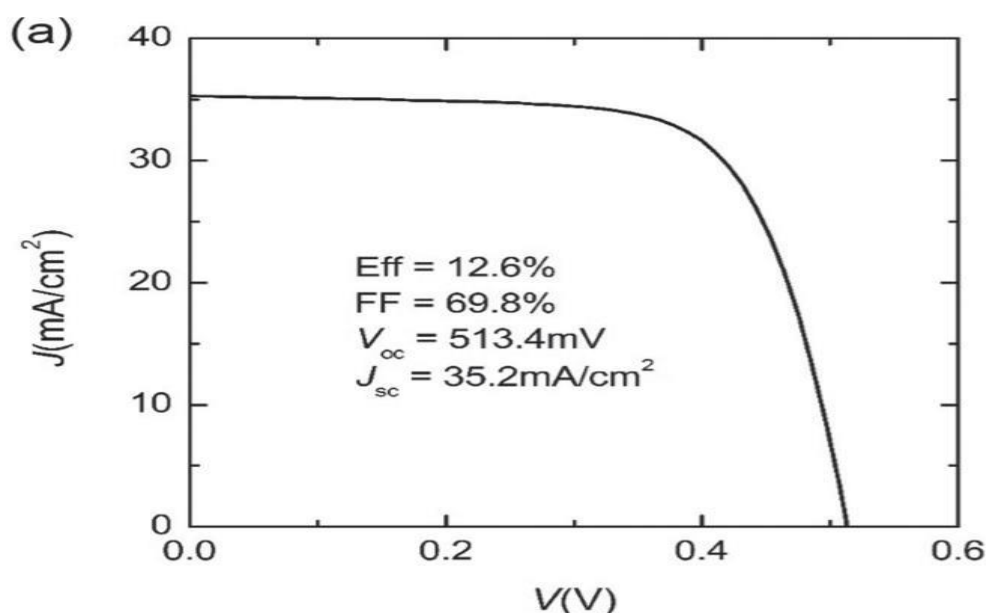


Figure I.8 : Courbe de J-V de cellule solaire CZTSSe certifiée de record mondial par Newport d'efficacité de 12.6% [2].

I.7 Conclusion

Le CZT(S, Se) est un matériau qui a fait l'objet de recherches approfondies. Dans ce chapitre, nous avons abordé plus précisément ses caractéristiques et ses avantages pour le domaine du photovoltaïque. Ensuite, nous avons examiné les composants d'une cellule solaire CZTSSe. Enfin, nous avons fini cette partie avec les performances de cette cellule solaire.

Chapitre II

*La présentation du logiciel et les
paramètres de la cellule photovoltaïque
à base de CZTSSe*

Chapitre II : La présentation du logiciel et les paramètres de la cellule photovoltaïque à base de CZTSSe.

II.1 Introduction

Pour améliorer les performances des cellules solaires photovoltaïques, Il est nécessaire d'optimiser ses paramètres. L'optimisation par simulation permet de prédire facilement les meilleurs paramètres de fabrication pour les cellules solaires les plus performantes.

Dans ce chapitre, on va présenter en premier temps les équations de base de modélisation des cellules solaires, Puis nous présentons le simulateur numérique et les différents paramètres utilisés dans la simulation de la cellule solaire à base de CZTSSe.

II.2 Équations fondamentales dans les semi-conducteurs

Les équations fondamentales de la physique sont l'équation de Poisson, les deux équations de courant et les deux équations de continuité. Ce système de cinq équations de base peut être ramené à un système de trois équations car les deux équations de courant sont en effet incluses dans les deux équations de continuité. La simulation numérique est basée sur la résolution de ces trois équations fondamentales qui régissent le transport de charge dans les semi-conducteurs.

II.2.1 Équation de Poisson

L'équation de Poisson s'exprime par :

$$\text{Div}\epsilon\nabla\psi = -\rho \quad (\text{II.1})$$

Où :

Ψ : Le potentiel électrostatique.

ϵ : La permittivité électrique du matériau.

ρ : La densité de charge d'espace.

II.2.2 Équations de continuité

L'équation de continuité décrit le taux de changement en fonction de la concentration de porteurs dans le temps. La cause du changement de concentration de trous ou l'électron est [21] :

- Les générations-recombinaisons internes.
- Les générations dues aux agents externes.
- Les phénomènes de transport.

Chapitre II : La présentation du logiciel et les paramètres de la cellule photovoltaïque à base de CZTSSe.

L'équation de continuité s'exprime par [21] :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = 1/q \operatorname{div} J_n + G_n - R_n \text{ pour les électrons} \quad (\text{II.2})$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -1/q \operatorname{div} J_p + G_p - R_p \text{ pour les trous} \quad (\text{II.3})$$

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

II.3 Phénomènes de recombinaison

Les principaux mécanismes de recombinaison des porteurs de charge libres dans les semi-conducteurs sont : la recombinaison SRH, radiatives, Auger et la recombinaison surface (cas particulier de SRH (Shockley-Read-Hall)).

À chaque mécanisme de recombinaison des porteurs de taux R est associée une durée de vie τ par la relation :

$$R = \frac{\Delta n(p)}{\tau n(p)} \quad (\text{II.4})$$

Où :

$\Delta n(p)$: La densité d'électrons (de trous) en excès. Dans notre cas, ils correspondent aux porteurs photo-générés [1].

$\tau n(p)$: La durée de vie d'électrons (de trous) en excès.

II.3.1 Recombinaison radiative

Le porteur en excès repasse directement de la bande de conduction à la bande de valence, en évacuant son énergie par émission d'un photon (figure II.1).

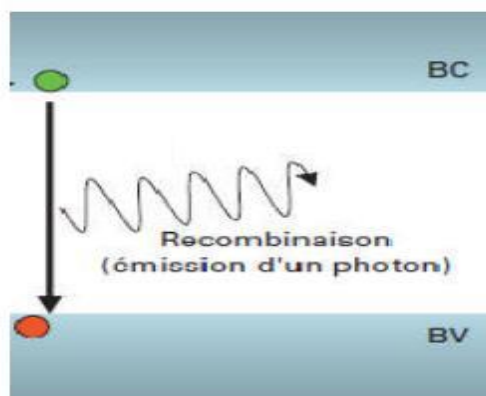


Figure II. 1 : Recombinaison radiative d'un électron de la bande de conduction avec un trou de la bande de valence [1].

Chapitre II : La présentation du logiciel et les paramètres de la cellule photovoltaïque à base de CZTSSe.

Ce processus est important pour les matériaux à bande interdite directe et faible pour les matériaux à gaps indirects. Le taux de recombinaison est défini par :

$$U = Br (np - n_i^2) \quad (\text{II.5})$$

Où :

Br : (cm^3/s) est le coefficient de recombinaison radiative. Pour un semi-conducteur à gap direct, Br est compris entre 10^{-11} et $10^{-9} \text{cm}^3/\text{s}$ [1].

n, p : Concentration des électrons et des trous respectivement.

n_i : Concentration intrinsèque.

II.3.2 Recombinaison Auger

La recombinaison Auger est un processus d'interaction à trois particules (figure II.2). L'excès d'énergie de la recombinaison d'une paire électron-trou est fourni à une troisième particule qui peut être un trou dans la bande de valence ou un électron dans la bande de conduction [1].

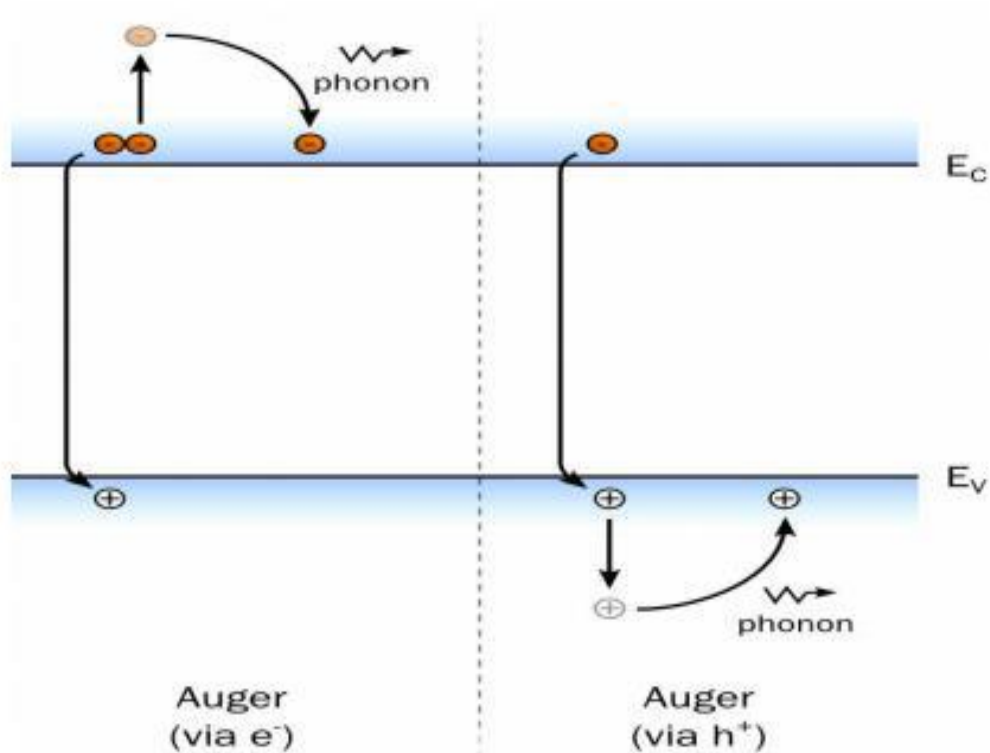


Figure II.2 : Exemple de recombinaison Auger [3].

Chapitre II : La présentation du logiciel et les paramètres de la cellule photovoltaïque à base de CZTSSe.

L'expression correspondante du taux de recombinaison s'écrit [5] :

$$U = (C_n n + C_p p) (np - n_i^2) \quad (\text{II.6})$$

Avec :

C_n et **C_p** : Sont les coefficients Auger pour les électrons et les trous.

np : Concentration des électrons et des trous respectivement.

n_i : Concentration intrinsèque.

II.3.3 La recombinaison Shockley Read Hall (SRH)

Les recombinaisons SRH se font par l'intermédiaire des niveaux d'énergie des défauts situés dans la bande interdite. La théorie élaborée par Shockley, Read et Hall [14,27] décrit les phénomènes d'émission et de capture des charges. Le processus de recombinaison SRH est représenté sur la (figure II.3).

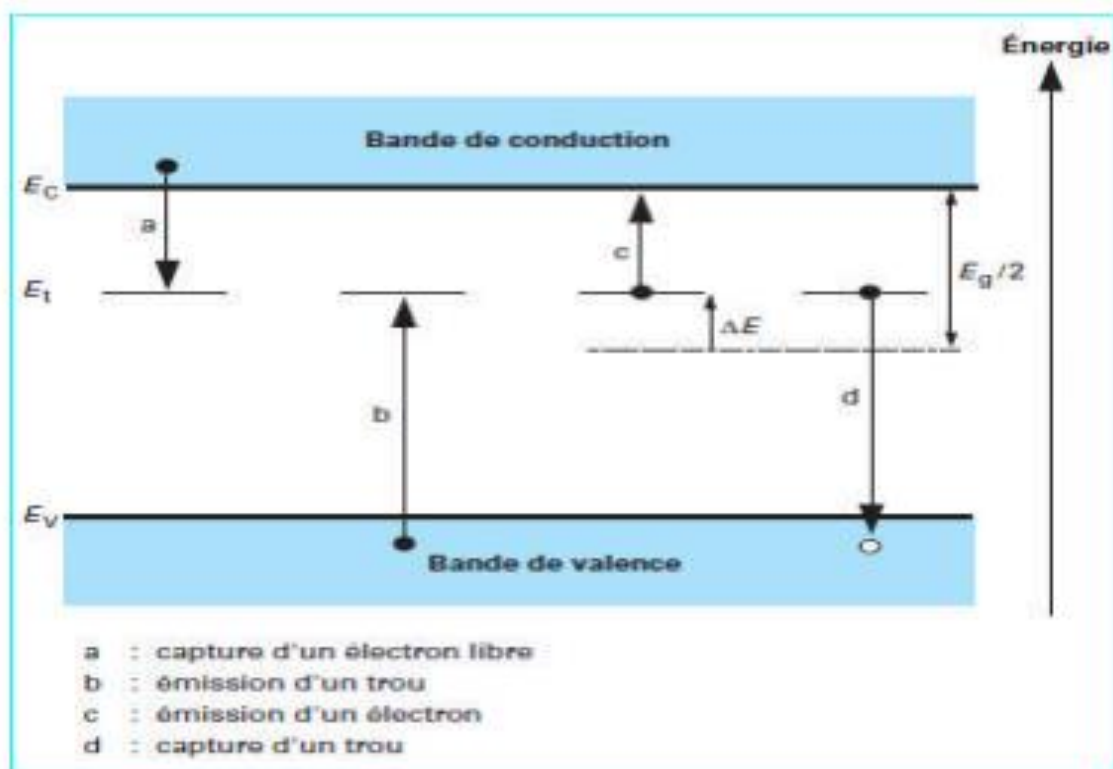


Figure II.3 : Schéma représentatif du phénomène de la recombinaison SRH [28].

La présence inévitable des impuretés et l'imperfection cristallines dans les semi-conducteurs cause l'apparition d'états électroniques permis dans le gap. Ces défauts peuvent jouer le rôle de pièges à électrons (trous) qui piègent momentanément les électrons (les trous) avant de les

Chapitre II : La présentation du logiciel et les paramètres de la cellule photovoltaïque à base de CZTSSe.

renvoyer vers la bande de conduction (la bande de valence) ce qui influence la conductivité du semi-conducteur (figure II.3).

Ils peuvent aussi jouer le rôle de centre de recombinaison des paires électrons-trous par la capture d'un électron de la bande de la conduction et d'un trou de la bande de valence [19].

Le taux de la recombinaison Shockley Read Hall est donné par l'expression suivante :

$$R_{SRH} = \frac{p_n - n_i^2}{\tau_n(p + p_1) + \tau_p(n + n_1)} \quad (\text{II.7})$$

Où n_i correspond à la concentration intrinsèque, n et p représentent les concentrations des électrons et des trous libres et n_1 et p_1 , représentent les termes d'émission et sont donnés par:

$$n_1 = n_i \exp\left(\frac{E_i - E_{Fi}}{k_B T}\right) \text{ et } p_1 = n_i \exp\left(\frac{E_{Fi} - E_i}{k_B T}\right) \quad (\text{I.8})$$

Tels que E_i représente l'énergie du niveau piège proche du milieu de la bande interdite, E_{Fi} le niveau de Fermi intrinsèque et τ_n et τ_p sont les durées de vie des électrons et des trous.

II.4 Logiciel SCAPS

SCAPS-1D "Solar Cell Capacitance Simulator one Dimension" est un programme de simulation de cellule solaire unidimensionnel développé au département d'électronique et de systèmes d'information (ELIS) de l'université de Gand, Belgique [29].

SCAPS est un programme conçu pour fonctionner sous le système Windows, développé par Lab =Windows/CVI de la national Instruments. Il s'ouvre avec l'icône 'Action Panel'. La fenêtre qui s'ouvre est présentée dans la (figure II.4) [30].

Chapitre II : La présentation du logiciel et les paramètres de la cellule photovoltaïque à base de CZTSSe.

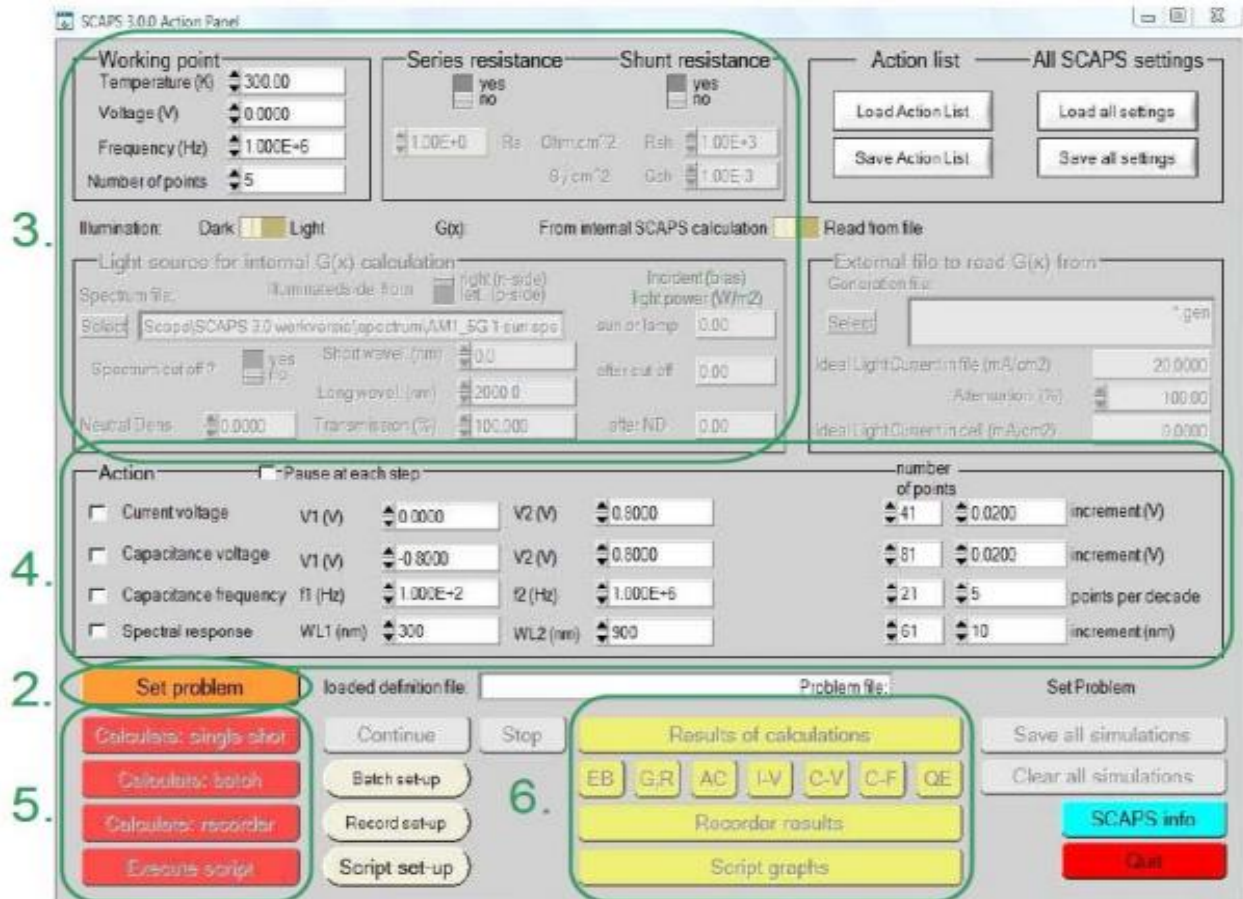


Figure II.4 : Panneau de démarrage de SCAPS, le panneau d'action ou principal.

La description des blocs numérotés de 1 à 6 est [31] :

1. Lancer SCAPS.
2. Définir le problème, ainsi que la géométrie, les matériaux et toutes les propriétés de la cellule solaire étudiée.
3. Indiquer les circonstances dans lesquelles la simulation est effectuée (spécifier le point de fonctionnement).
4. Indiquer la mesure à simuler.
5. Commencer le(s) calcul(s).
6. Afficher les courbes de simulation.

SCAPS est développé à l'origine pour des structures des cellules de CuInSe₂ et de CdTe. Cependant, plusieurs versions ont amélioré ses capacités de façon à devenir applicable pour des cellules solaires cristallines (Si et GaAs) et des cellules amorphes.

Un aperçu de ses caractéristiques principales est donné ci-dessous[32] :

➤ Peut simuler jusqu'à 7 couches semi-conductrices.

Chapitre II : La présentation du logiciel et les paramètres de la cellule photovoltaïque à base de CZTSSe.

- Presque tous les paramètres peuvent être introduits avec variations graduées (dépendance de la composition et de la profondeur de la cellule).
- Mécanismes de recombinaison : bande à bande (direct), SRH et Auger.
- Les niveaux de défauts : en volume ou à l'interface, en considérant leurs états de charge et la recombinaison à leurs niveaux.
- Les niveaux des défauts, type de charge : pas de charge (neutre), monovalent (un seul donneur, accepteur), divalent (double donneur, double accepteur, amphotère), multivalent (défini par l'utilisateur).
- Contacts : Travail de sortie du métal ou régime de bande plate ; Propriété optique (Réflexion ou transmission) du filtre.

II.4.1 Choix de la cellule solaire

Lorsque le bouton "Set Questions" est cliqué sur le pupitre opérateur, le panneau "SOLAIRE DEFINITION" s'affiche. Le dernier paramètre est utilisé pour créer ou modifier la structure de la cellule solaire et enregistrer les charges d'autres fichiers.

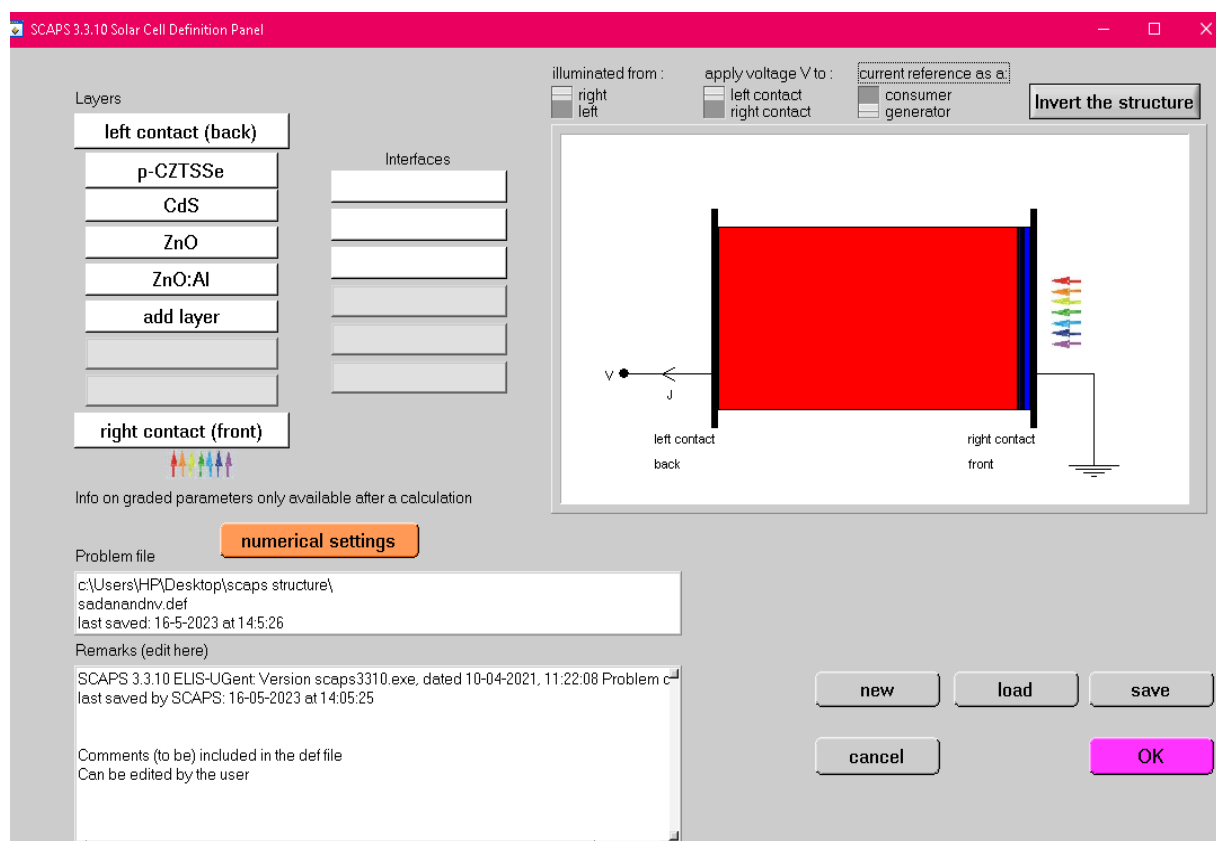


Figure II.5 : Définition de la structure d'une cellule solaire.

Chapitre II : La présentation du logiciel et les paramètres de la cellule photovoltaïque à base de CZTSSe.

II.4.2 Les propriétés des couches

La fenêtre représentée sur la (figure II.6) contient plusieurs paramètres tels que l'énergie de gap, la permittivité, l'affinité, le dopage, le type de dopage. Il convient de noter que les utilisateurs peuvent utiliser directement les valeurs standards dans les fichiers de données du logiciel.

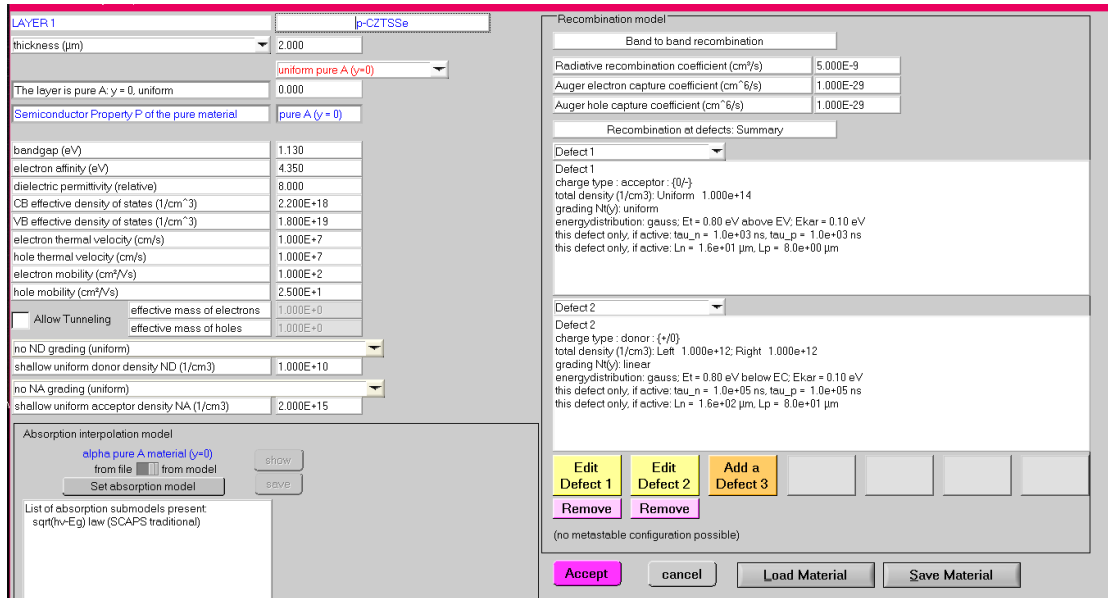


Figure II.6 : Paramètres d'une couche (absorbeur CZTSSe) d'une cellule solaire.

II.4.3 Résultat de la simulation (Caractéristique J(V))

Exécuter la simulation « Calculate », noter les résultats de simulation (J_{CC} , V_{co} , FF, η) dans la fenêtre « J-V panel », la caractéristique J-V..., On peut afficher et copier ces résultats sous forme de tableau en appuyant « show ».

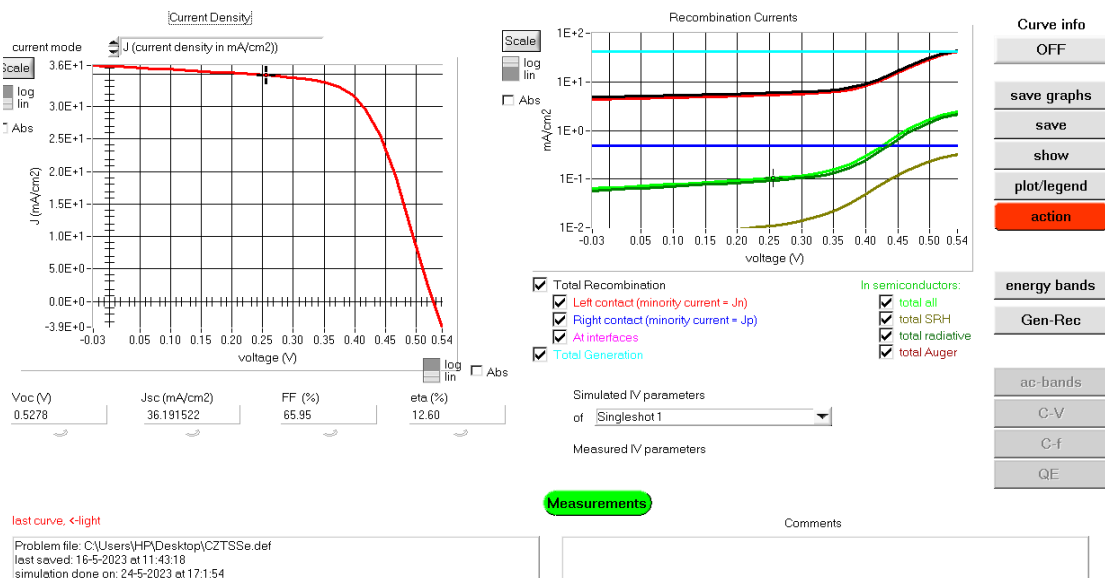


Figure II.7 : Panneau d'affichage des courbes J-V en éclaircissement.

II.5 Présentation de la structure de la cellule solaire CZTSSe

La (figure II.8) représente les différentes structures de la cellule solaires en couches minces à base de CZTSSe que nous allons simulées par le logiciel SCAPS. Ces structures sont les suivantes : Mo |CZTSSe | CdS | ZnO | ZnO : Al | Ni, Mo |CZTSSe | ZnSe | ZnO | ZnO : Al | Ni et Mo |CZTSSe |Cd_{0.4}Zn_{0.6}S | ZnO | ZnO : Al | Ni.

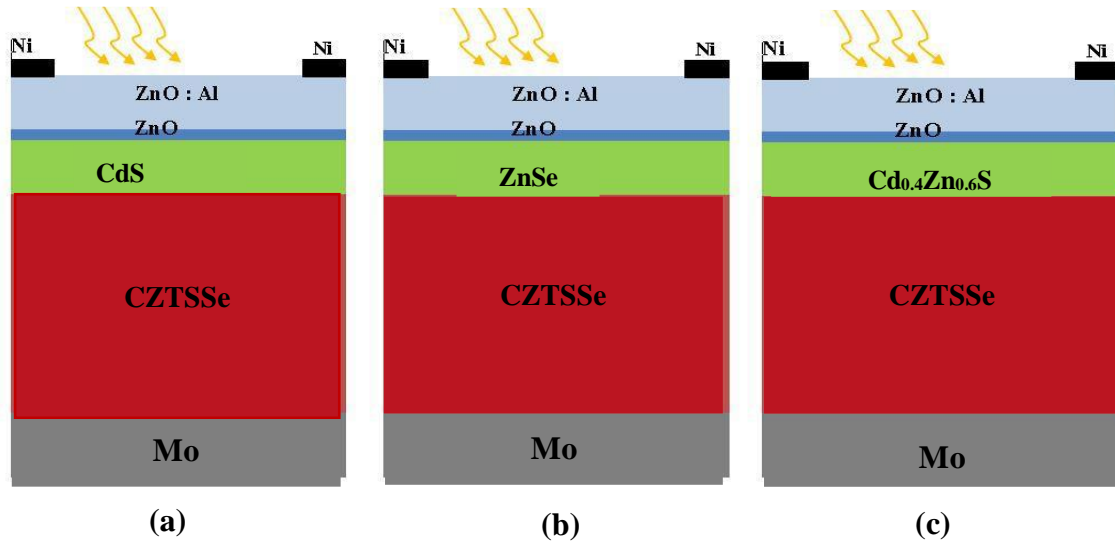


Figure II.8 : Les structures des cellules solaires en couches minces en CZTSSe : (a) Mo |CZTSSe | CdS | ZnO | ZnO : Al | Ni, (b) Mo |CZTSSe | ZnSe | ZnO | ZnO : Al | Ni, (c) Mo |CZTSSe | Cd_{0.4}Zn_{0.6}S | ZnO | ZnO : Al | Ni.

II.6 Paramètres de simulation de la cellule solaire CZTSSe

II.6.1 Contacts et Résistances

Le molybdène (Mo) et le nickel (Ni) sont les contacts les plus utilisés dans la technologie CZTSSe [33]. Mo est utilisé comme contact arrière et Ni comme contact avant.

Dans notre simulation, les contacts métalliques sont définis en fonction de travail de sortie et les taux de recombinaison de surface (SRV) [1]. Les caractéristiques électriques des contacts sont résumées dans le (tableau II.1) :

Tableau II.1 : Les paramètres électriques des contacts utilisés dans la simulation [34].

Propriétés	Contact arrière	Contact avant
Travail de sortie	5.0 eV (Mo)	5.1 eV (Ni)
VRS d'électron	10 ⁵ cm/s	10 ⁷ cm/s
VRS de trou	10 ⁷ cm/s	10 ⁵ cm/s

Chapitre II : La présentation du logiciel et les paramètres de la cellule photovoltaïque à base de CZTSSe.

Les valeurs de la résistance en série et la résistance en parallèle de la cellule solaire étudiée sont respectivement $0.72 \Omega\text{cm}^2$ et $6.21 \times 10^2 \Omega \text{cm}^2$ [2].

II.6.2 Paramètres des couches de la cellule solaire

Le tableau regroupe les paramètres des différents matériaux utilisés dans la simulation.

Tableau II.2 : Paramètres des différents matériaux utilisés dans la simulation.

Couches Paramètres	p-CZTSSe	n-Cds	n-ZnSe	n-Cd _{0.4} Zn _{0.6} S	ZnO	ZnO :Al
d (µm)	2 [2]	0.025 [2]	0.025 [35]	0.025 [36]	0.010[2]	0.050 [2]
Eg (eV)	1.13 [2]	2.4 [34]	2.71 [35]	2.98 [36]	3.1 [37]	3.3 [37, 38]
ε _r	8 [2]	10 [34, 37]	8.1 [35]	9.4 [36]	9 [34, 37]	9 [34, 37]
χ (eV)	4.35	4.2 [34]	4.09 [35]	4.2 [36]	4.4 [34]	4.6 [33, 32]
μ _n / μ _p (cm ² /Vs)	100/ 25 [39]	100/25 [34]	100/16 [35]	270/27 [36]	100/25 [34]	100/25 [34]
N _c (cm ⁻³)	2.2.10 ¹⁸ [21]	2.2.10 ¹⁹ [34]	5.10 ¹⁸ [35]	2.2.10 ¹⁸ [36]	2.2.10 ¹⁸ [34]	2.2.10 ¹⁸ [34]
N _v (cm ⁻³)	1.8.10 ¹⁹ [21]	1.8.10 ¹⁹ [34]	1.8.10 ¹⁹ [35]	1.8.10 ¹⁹ [36]	1.8.10 ¹⁹ [34]	1.8.10 ¹⁹ [34]
v _n / v _p (cm/s)	10 ⁷ ./10 ⁷ [42]	10 ⁷ / 10 ⁷ [25]	10 ¹⁷ /10 ⁷ [35]	10 ⁷ /10 ⁷ [36]	10 ⁷ /10 ⁷ [25]	10 ⁷ /10 ⁷ [25]
ND (cm ⁻³)	10 ¹⁰	10 ¹⁷ [37, 38]	10 ¹⁷ [35]	10 ¹⁷ [36]	10 ¹⁶ [37]	10 ¹⁸ [37]
NA (cm ⁻³)	2.10 ¹⁵	10 ¹⁰	10 ¹⁰	10 ¹⁰ [36]	10 ¹⁰	10 ¹⁰

Les paramètres du tableau sont reportés dans la littérature, on mentionne l'épaisseur du matériau (d), l'énergie de gap (Eg), la permittivité relative (ε_r), l'affinité électronique (χ), la mobilité des électrons (μ_n), la mobilité de trous (μ_p), la densité d'état dans la bande de conduction(N_c), la densité d'état dans la bande de valence (N_v), la vitesse thermique des électrons (v_n), la vitesse thermique des trous (v_p), la densité du donneur (ND), la densité de l'accepteur (NA) [1].

II.6.3 Défauts

En général, il existe des défauts de type donneur (D) et de type accepteur (A) dans les semi-conducteurs. Dans notre étude, la distribution des défauts est de forme gaussienne.

Le (tableau II.3) résume les différents paramètres de défaillance. EA(D) est l'énergie de crête gaussienne, Wd est la largeur de distribution, Nth est la concentration de défauts (eV) et σ_n(p) est la fraction piégée. Les valeurs de ces paramètres sont tirées de refs. [38, 9].

Chapitre II : La présentation du logiciel et les paramètres de la cellule photovoltaïque à base de CZTSSe.

Tableau II.3 : Paramètres de la densité de défauts des matériaux.

	p-CZTSSe	n-CdS	n-ZnSe	n-Cd_{0.4}Zn_{0.6}S	ZnO	ZnO :Al
Type de défaut	A / D	A / D	A / D	A/D	A / D	A / D
σ_n (cm²)	10⁻¹⁵ /10⁻¹⁵	10⁻¹⁵ /10¹⁵	10⁻¹⁵ /10¹⁵	10⁻¹⁵ /10⁻¹⁵	10⁻¹³ /10⁻¹⁷	10⁻¹³ /10⁻¹⁷
σ_p (cm²)	10⁻¹⁵ /10⁻¹⁵	10⁻¹³ /10⁻¹⁷	10⁻¹³ /10⁻¹⁷	10⁻¹³ /10⁻¹⁷	10⁻¹⁵ /10⁻¹⁵	10⁻¹⁵ /10⁻¹⁵
EA (eV)	Ev + 0.8	Ev + 1.2	Ev + 1.2	Ev + 1.2	Ev + 1.55	Ev + 1.65
ED (eV)	Ec - 0.8	Ec - 1.2	Ec - 1.2	Ec - 1.2	Ec - 1.55	Ec - 1.65
W_{A/D}	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
N_{thA/D}	10¹⁴ /10¹²	10¹² /10¹⁴	10¹² /10¹⁴	10¹² /10¹⁴	10¹⁴ /10¹²	10¹⁴ /10¹²

II.7 Conclusion

Les différentes étapes que nous avons décrites dans ce chapitre permettent de bien comprendre le fonctionnement du logiciel et de l'utiliser dans la simulation. Par conséquent, il est nécessaire d'optimiser la structure des dispositifs photovoltaïques et leurs principales caractéristiques, ainsi que les paramètres qui affectent leurs caractéristiques.

Chapitre III

Résultats et discussions

III.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous nous sommes intéressés à optimiser les paramètres d'un type de cellule solaire en couches minces à base de CZTSSe. Nous allons tout d'abord simuler une cellule de référence avec un ensemble de paramètres fixés, puis nous allons étudier l'influence des différents paramètres en faisant varier les paramètres géométriques et physiques afin d'analyser leur influence sur les caractéristiques de sortie de la cellule solaire.

III.2 Simulation de la cellule solaire à base de CZTSSe de référence

La structure (Mo | CZTSSe | CdS | ZnO | ZnO : Al | Ni) et les paramètres de la cellule solaire à base de CZTSSe de référence sont présentés dans le chapitre précédent. La caractéristique densité de courant-tension $J(V)$ de la cellule solaire à base de CZTSSe sous l'irradiation du spectre solaire AM 1.5 et de la densité de puissance 1000 W/cm^2 est illustrée dans la (figure III.1).

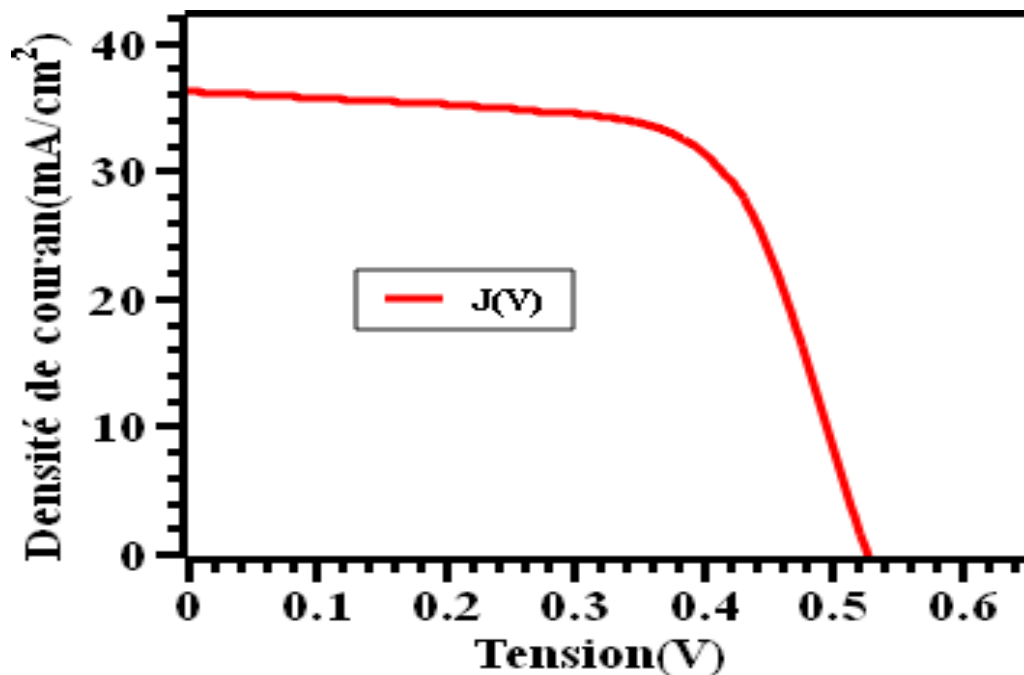


Figure III.1 : Caractéristique $J(V)$ de la cellule solaire à base de CZTSSe.

Les paramètres électriques de cellule solaire étudiée ont été évalués sur la base de la caractéristique simulée ($J-V$). Ils sont représentés dans le (tableau III.1) avec ceux de la cellule solaire à base de CZTSSe de record mondial certifiée par Newport [2].

Chapitre III : Résultats et discussions.

Les paramètres électriques de la cellule solaire simulée sont : $J_{cc} = 36.19 \text{ mA/cm}^2$, $V_c=0.52\text{V}$, $FF=65.95\%$ et le $\eta =12.60 \%$. Nous remarquons que les paramètres électriques obtenus de notre structure se rapprochent à ceux de la cellule solaire à base de CZTSSe de record mondial certifiée par Newport.

Tableau III.1 : Les Paramètres électriques de la cellule solaire à base de CZTSSe simulée et de la cellule solaire à base de CZTSSe de record mondial certifiée par Newport [2].

Structure	V_{co} (V)	J_{cc} (mA / cm^2)	FF (%)	η (%)
CdS /CZTSSe	0.5278	36.19	65.95	12.60
CdS /CZTSSe [2]	0.5134	35.2	69.81	12.60

III.3 Performances de la cellule solaire CZTSSe avec différentes couches tampons

Les caractéristiques $J(V)$ de la cellule solaire à base de CZTSSe pour les trois couches tampons (CdS, ZnSe et $\text{Cd}_{0.4}\text{Zn}_{0.6}\text{S}$) sous l'éclairement par le spectre solaire AM 1.5 et de la densité de puissance 1000W/cm^2 sont présentées par la (figure III.2).

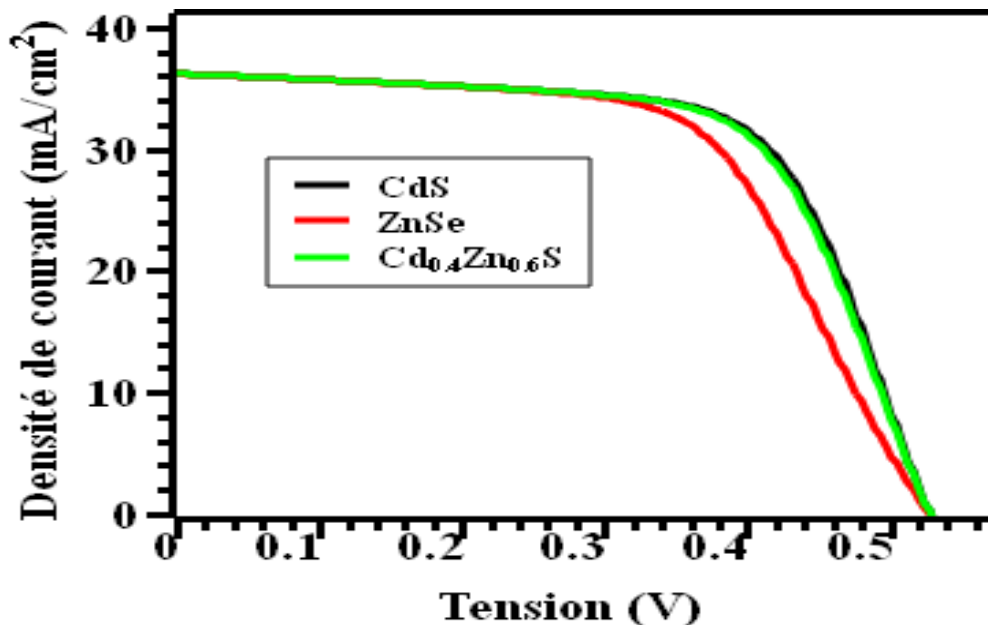


Figure III.2 : Caractéristique $J(V)$ de la cellule solaire à base de CZTSSe pour les trois couches tampons.

Chapitre III : Résultats et discussions.

Cette figure montre l'influence de la nature de la couche tampon sur la caractéristique $J(V)$ de la cellule solaire CZTSSe. On voit que la densité de courant reste constante de 0V à 0.34V. Après cette valeur commence à diminuer jusqu'à zéro.

Les paramètres externes de ces cellules solaires sont récapitulés dans le (tableau III.2).

Tableau III.2 : Paramètres électriques de la cellule solaire à base de CZTSSe pour différentes couches tampons simulées et de la cellule solaire à base de CZTSSe de record mondial certifiée par Newport [2].

Structure	V_{co} (V)	J_{cc} (mA / cm ²)	FF (%)	η (%)
CdS /CZTSSe	0.5278	36.19	65.95	12.60
ZnSe/CZTSSe	0.5272	36.18	60.61	11.56
Cd _{0.4} Zn _{0.6} S/CZTSSe	0.5278	36.19	65.34	12.48
CdS /CZTSSe [2]	0.5134	35.2	69.81	12.60

Il est clair que les structures de la cellule solaire à base de CZTSSe avec CdS ou Cd_{0.4}Zn_{0.6}S montrent des performances plus efficaces. On constate que la meilleure performance est obtenue avec le CdS en tant que couche tampon avec un rendement de 12.60 % et un FF de 65.95%.

III.4 Effet de la couche CZTSSe sur les performances de la cellule solaire

III.4.1 Effet du dopage de la couche en CZTSSe

Pour une couche en CZTSSe (2 μ m), couche tampon (25 nm) et ZnO : Al (50 nm), nous avons simulés les paramètres de la cellule solaire pour différentes valeurs de la concentration du dopage de la couche CZTSSe ($N_{A/CZTSSe}$), allant de 10^{14} cm⁻³ à 10^{18} cm⁻³. L'influence du dopage $N_{A/CZTSSe}$ de la couche d'absorbeur CZTSSe pour différentes couches tampons sur les paramètres externes est illustrée dans la (figure III.3).

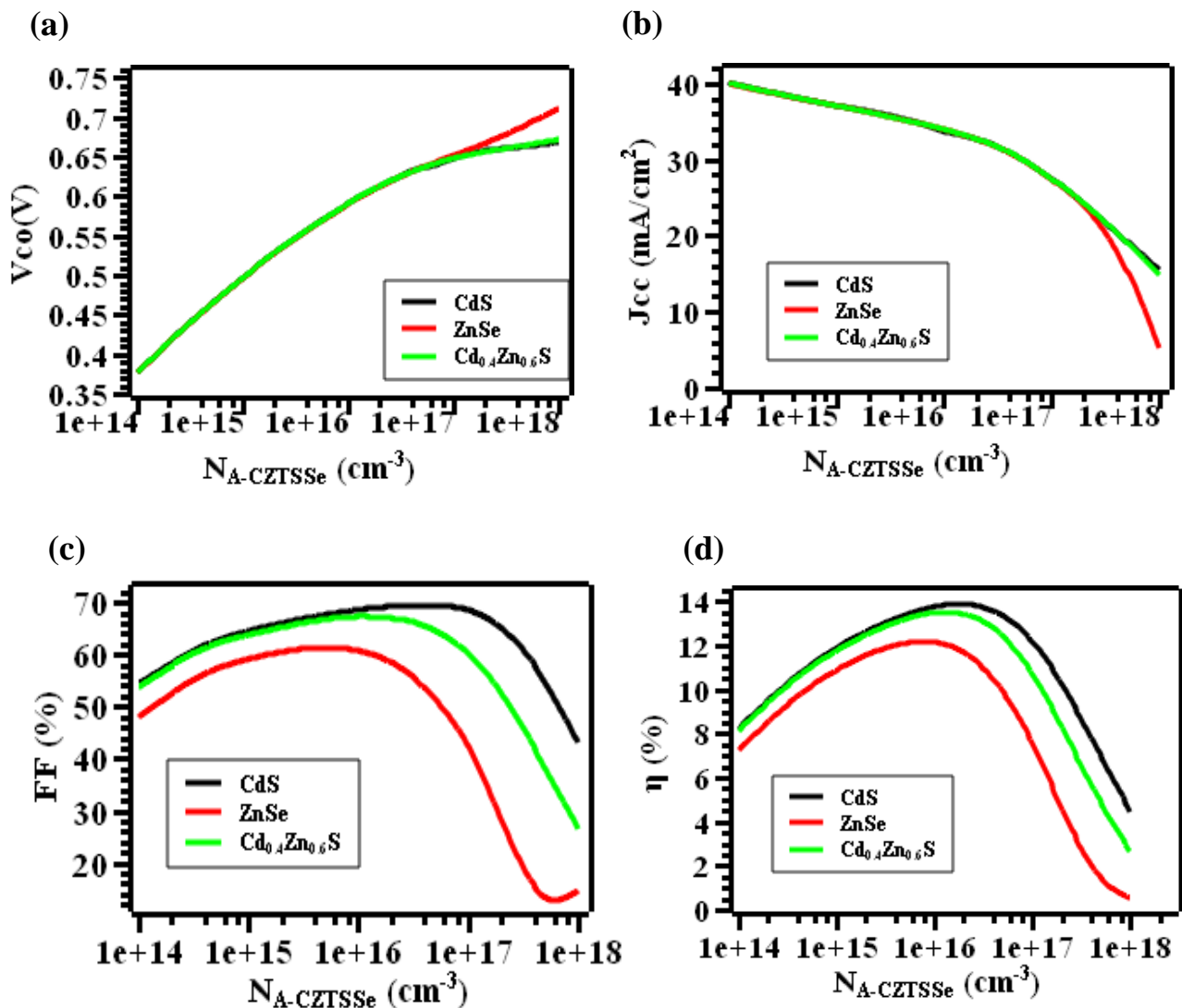


Figure III.3 : Influence du dopage $N_{A-CZTSSe}$ de la couche d'absorbeur CZTSSe sur les paramètres externes : (a) V_{co} , (b) J_{cc} , (c) FF et (d) η .

Dans la (figure III.3) (a), on voit que le V_{co} (V) des trois couches tampons (CdS, ZnSe, $\text{Cd}_{0.4}\text{Zn}_{0.6}\text{S}$) augmente de 10^{14} cm^{-3} jusqu'à 6×10^{16} cm^{-3} . Ce phénomène peut être expliqué par l'augmentation du courant de saturation, après cette valeur on voit que le V_{co} avec la couche tampon ZnSe continue à augmenter, mais le V_{co} avec les deux couches restantes semble constant.

Dans la (figure III.3) (b), nous pouvons remarquer que lorsque le dopage augmente, la valeur du J_{cc} diminue. Ceci est principalement dû au fait qu'une densité de porteurs plus élevée augmente le processus de recombinaison et réduit la probabilité de collecter des électrons à partir des photons générés [19]. Après la valeur de 2×10^{17} cm^{-3} , on voit que le J_{cc} avec la couche tampon ZnSe diminue d'une façon plus rapide que les autres couches tampons.

Chapitre III : Résultats et discussions.

Dans la (figure III.3) (c), quand le dopage $N_{A/CZTSSe}$ augmente de 10^{14}cm^{-3} à 10^{16}cm^{-3} , le facteur de forme « FF » augmente et passe de 54.37% à 69.44% pour la couche tampon CdS et de 48.04% à 61.26% pour la couche ZnSe et pour la couche $\text{Cd}_{0.4}\text{Zn}_{0.6}\text{S}$, il passe de 53.71% à 67.29%.

Dans la (figure III.3) (d), quand le dopage $N_{A/CZTSSe}$ augmente de 10^{14}cm^{-3} à 10^{16}cm^{-3} , le rendement « η » augmente et passe de 8.22% à 13.89 % pour la couche tampon CdS et de 7.24% à 12.15% pour la couche ZnSe et pour la couche $\text{Cd}_{0.4}\text{Zn}_{0.6}\text{S}$, il passe de 8.12% à 13.51%.

Pour des valeurs de dopages supérieures à 10^{16}cm^{-3} , le η et FF diminuent. Les caractéristiques des matériaux semi-conducteurs sont fortement influencées par les impuretés ou les défauts. Ces derniers sont ajoutés pour augmenter la conductivité électrique et améliorer les caractéristiques de la cellule solaire mais à partir d'un certain seuil de cette quantité, agissent comme un facteur de pertes qui réduisent le rendement de conversion. Dans notre simulation, la valeur optimale du dopage de la couche absorbeur CZTSSe est autour de 10^{16}cm^{-3} . Les paramètres externes des trois structures pour la valeur optimale de la couche absorbante sont récapitulés dans le (tableau III.3) :

Tableau III.3 : Paramètres externes optimaux des trois structures pour des valeurs de dopage de la couche CZTSSe ($N_{A-CZTSSe}$) autour de 10^{16}cm^{-3} .

Structure	$N_{A-CZTSSe} (\text{cm}^{-3})$	Voc(V)	Jcc(mA/cm ²)	FF(%)	η (%)
ZnSe/CZTSSe	10^{16}	0.5899	33.94271	60.70	12.15
$\text{Cd}_{0.4}\text{Zn}_{0.6}\text{S}/\text{CZTSSe}$	10^{16}	0.5907	33.959104	67.29	13.50
CdS/CZTSSe	$2 \cdot 10^{16}$	0.6132	32.71320	69.22	13.89

Nous remarquons que la meilleure performance est obtenue avec CdS en tant que couche tampon avec un rendement de 13.89 %, ($V_{co} = 0.6132\text{V}$, $J_{cc} = 32.7 \text{ mA/cm}^2$ et $\text{FF} = 69.22\%$).

III.4.2 Effet de l'épaisseur de la couche en CZTSSe

Nous avons fait varier l'épaisseur de la couche CZTSSe (d_{CZTSSe}) entre 0.5 μm et 5 μm pour voir son influence sur les paramètres électriques et nous fixons les paramètres suivants :

Chapitre III : Résultats et discussions.

$N_{A/CZTSSe} = 2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $N_{D/\text{tampon}} = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et $d_{\text{tampon}} = 0.025 \text{ }\mu\text{m}$ et $N_{D/n\text{-ZnO}} = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et $d_{\text{ZnO:Al}} = 0.05 \text{ }\mu\text{m}$.

La (figure III.4) montre l'influence de l'épaisseur de la couche absorbante CZTSSe (d_{CZTSSe}) sur les paramètres extrinsèques J_{cc} , V_{co} , le facteur de forme (FF) et l'efficacité (η) de la cellule solaire étudiée. L'augmentation de l'épaisseur de la couche absorbante de type p de CZTSSe augmente les paramètres externes.

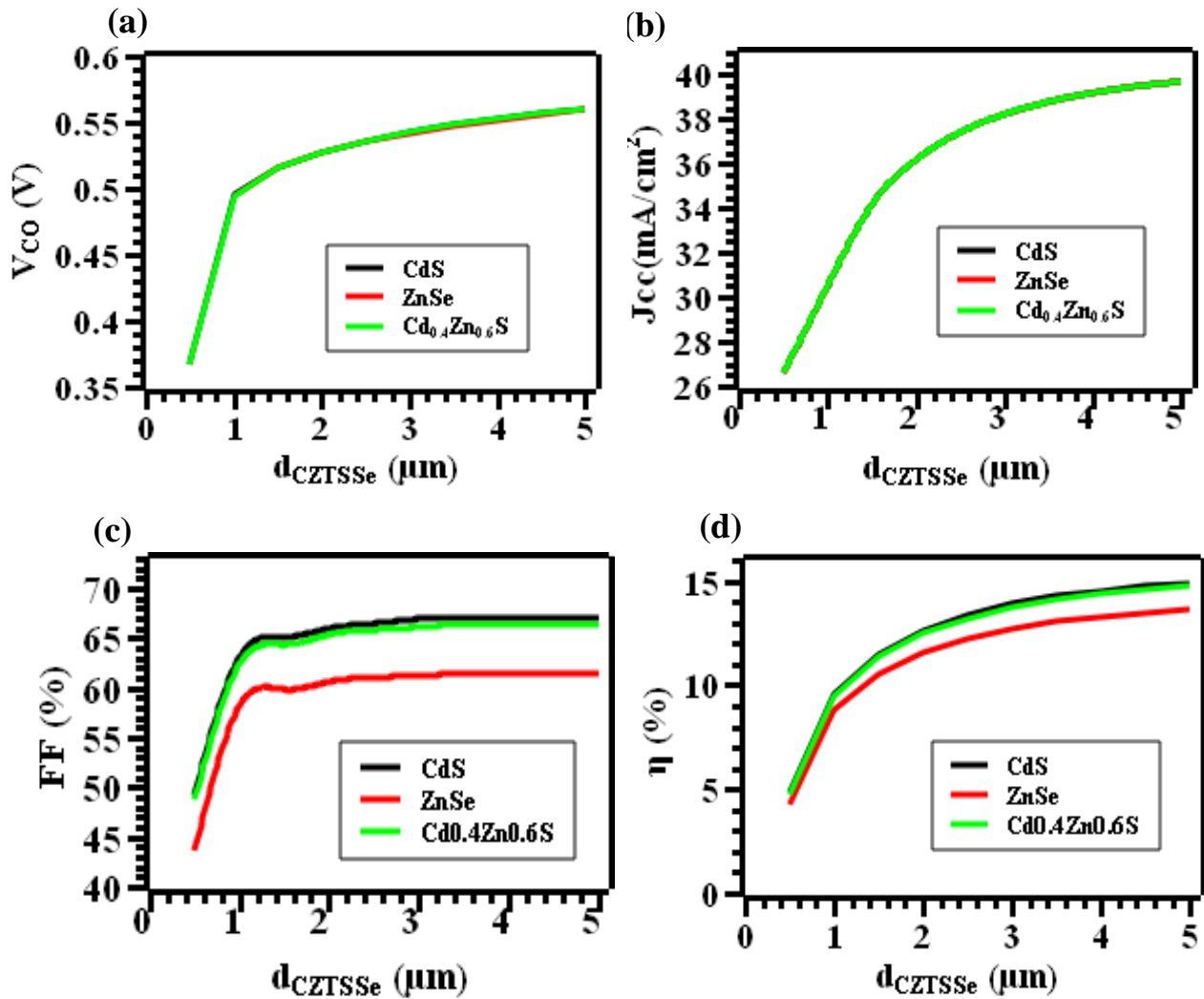


Figure III.4 : Influence de l'épaisseur de la couche absorbante CZTSSe sur les paramètres externes : (a) V_{co} , (b) J_{cc} , (c), FF et (d) η .

Dans la (figure III.4) (a) et (b), le V_{co} et le J_{cc} augmentent avec l'accroissement de l'épaisseur de CZTSSe, alors que tous les paramètres sont faibles à une faible épaisseur de la couche absorbante, ce qui est dû à la forte recombinaison de porteurs photo-générés qui se recombinent avant d'atteindre l'interface couche tampon/couche CZTSSe.

Chapitre III : Résultats et discussions.

Le V_{co} et le J_{cc} augmentent de $0.5\mu\text{m}$ à $2\mu\text{m}$, au-dessus de cette valeur, ces paramètres sont assez constants.

D'après la (figure III.4) (c), plus la couche absorbante est épaisse, plus le facteur de forme est élevé. Il augmente proportionnellement à l'épaisseur de la couche absorbante de $0.5\mu\text{m}$ à $1\mu\text{m}$. Une augmentation supplémentaire de l'épaisseur de la couche absorbante entraîne une légère diminution de FF.

Dans la (figure III.4) (d), l'impact de la variation d'épaisseur sur l'efficacité des cellules solaires a été notée par simulation dans les trois constructions distinctes CdS, ZnSe, $\text{Cd}_{0.4}\text{Zn}_{0.6}\text{S}$. Pour chaque stimulation, l'épaisseur de la couche absorbante était comprise entre $0.5\mu\text{m}$ et $5\mu\text{m}$. Pour une structure à base CdS, le rendement varie entre 4.82% et 14.91%, et le plus haut rendement trouvé correspondant à une épaisseur de $5\mu\text{m}$ de la couche absorbante. Dans cette partie, nous pouvons constater que le taux d'augmentation de l'efficacité est lent lorsque l'épaisseur de la couche est de plus de $2.5\mu\text{m}$, ce qui signifie que l'épaisseur de l'ordre $2.5\mu\text{m}$ est suffisante pour absorber la plupart du spectre solaire.

Par conséquent, si l'on prend en compte le coût des matériaux et le processus de fabrication, il ne serait pas rentable pour produire des cellules solaires CZTSSe avec des couches absorbantes épaisses.

Pour une épaisseur de $2.5\mu\text{m}$, les paramètres externes des trois structures sont présentés dans le (tableau III.4).

Tableau III.4 : Paramètres externes optimaux des trois structures pour une épaisseur de $2.5\mu\text{m}$.

Structure	d_{CZTSSe} (μm)	V_{oc} (V)	J_{cc} (mA/m^2)	FF(%)	η (%)
ZnSe/CZTSSe	2.5	0.5356	37.419836	61.02	12.23
$\text{Cd}_{0.4}\text{Zn}_{0.6}\text{S}/\text{CZTSSe}$	2.5	0.5362	37.425401	65.80	13.20
CdS/CZTSSe	2.5	0.5362	37.424400	66.45	13.33

Nous remarquons que la meilleure performance est obtenue avec le CdS en tant que couche tampon avec un rendement de 13.33 %, ($V_{co} = 0.53\text{V}$, $J_{cc} = 37.42\text{ mA}/\text{cm}^2$ et $\text{FF} = 68.95\%$).

III.4.3 Effet de l'énergie de gap de la couche en CZTSSe

Nous avons également évalué dans cette étude l'impact de différentes énergies de gap de la couche absorbante CZTSSe sur la performance de la cellule solaire. L'énergie de gap a été variée de 1 eV à 1.5 eV par pas de 0.1 eV et on peut observer les changements dans les valeurs de J_{cc} , V_{co} , FF et η à la (figure III.5)

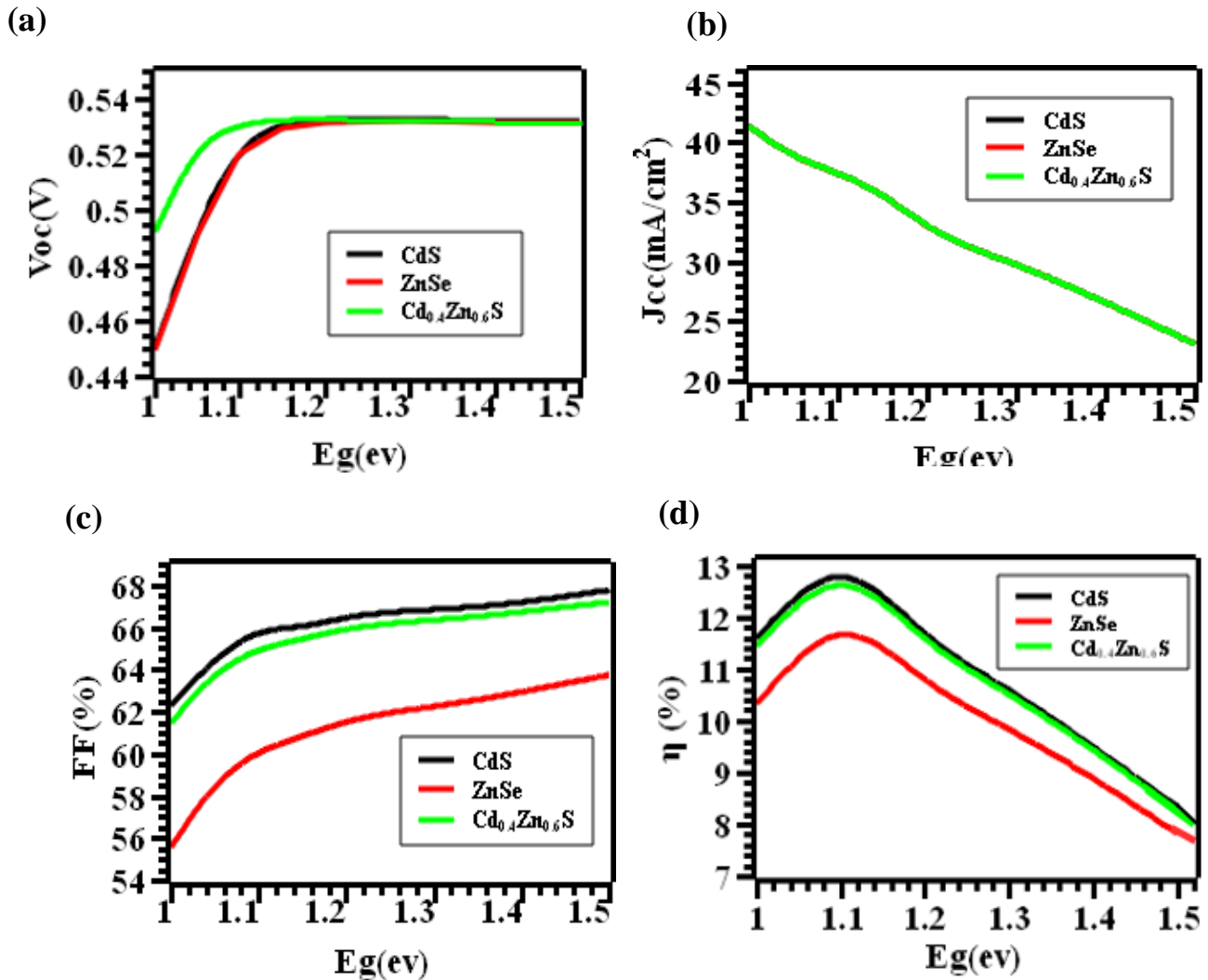


Figure III.5 : Influence de l'énergie de gap de la couche d'absorbeur CZTSSe sur les paramètres externes : (a) V_{co} , (b) J_{cc} , (c) FF et (d) η .

La (figure III.5) (a, c) montre clairement que le V_{co} et FF croissent substantiellement jusqu'à 1.2 eV et restent presque inchangés après cette valeur pour les trois couches tampons (CdS, ZnSe, Cd_{0.4}Zn_{0.6}S).

Dans la (figure III.5) (b), le J_{cc} décroît de façon linéaire pour les trois couches tampons (CdS, ZnSe, Cd_{0.4}Zn_{0.6}S). Cette décroissance peut s'expliquer par le fait les absorbeurs à gap

Chapitre III : Résultats et discussions.

large n'absorbent pas les photons à grandes longueurs d'onde. On peut donc observer une faible quantité de paires électron-trou générées et donc une faible quantité de porteurs libres collectés ; ce qui pourrait réduire la valeur de J_{cc} .

Dans la (figure III.5) (d), nous remarquons que le rendement de la cellule solaire augmente proportionnellement avec l'énergie de gap de CZTSSe jusqu'à 1.1eV. Pour un gap de 1.1eV, le rendement atteint la valeur de (12.77% pour le CdS, 11.65% pour ZnSe et 12.61% pour $Cd_{0.4}Zn_{0.6}S$).Après cette valeur, on voit que le rendement des trois couches commence à diminué. Cette décroissance de l'efficacité est due à la décroissance de J_{cc} , car le V_{co} et FF restent presque constants après cette valeur.

Tableau III.5 : Paramètres externes optimaux des trois structures pour une énergie de gap de 1.1eV.

Structure	Eg (eV)	Voc(V)	Jcc (mA/m ²)	FF(%)	η (%)
ZnSe/CZTSSe	1.1	0.5197	37.3559	60.01	11.65
$Cd_{0.4}Zn_{0.6}S$ /CZTSSe	1.1	0.5201	37.362701	64.88	12.61
CdS/CZTSSe	1.1	0.5201	37.36137	65.70	12.77

Nous remarquons que la meilleure performance est obtenue avec le CdS en tant que couche tampon avec un rendement de 12.77 %, ($V_{co} = 0.52V$, $J_{cc} = 37.36 \text{ mA/cm}^2$ et $FF = 68.95\%$).

Cette étude nous a permis, de trouver les différents paramètres optimaux de la couche CZTSSe pour avoir un meilleur rendement pour les trois structures. Nous présentons les paramètres optimaux des trois structures obtenues par notre simulation dans le tableau (III.4) :

Tableau III.6 Paramètres optimaux des trois structures.

Structure	$N_{A-CZTSSe} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	$d_{CZTSSe} \text{ (}\mu\text{m)}$	Eg (eV)
CdS/CZTSSe (avant optimisation)	$2 \cdot 10^{15}$	2	1.13
CdS/CZTSSe (après optimisation)	$2 \cdot 10^{16}$	2.5	1.1
ZnSe/CZTSSe (après optimisation)	10^{16}	2.5	1.1
$Cd_{0.4}Zn_{0.6}S$ /CZTSSe (après optimisation)	10^{16}	2.5	1.1

III.5 Caractéristiques J(V) des cellules solaires en CZTSSe optimales

Les caractéristiques J(V) de la cellule solaire à base de CZTSSe pour les trois couches tampons (CdS, ZnSe, Cd_{0.4}Zn_{0.6}S) après l'optimisation sont présentées dans la (figure III.6).

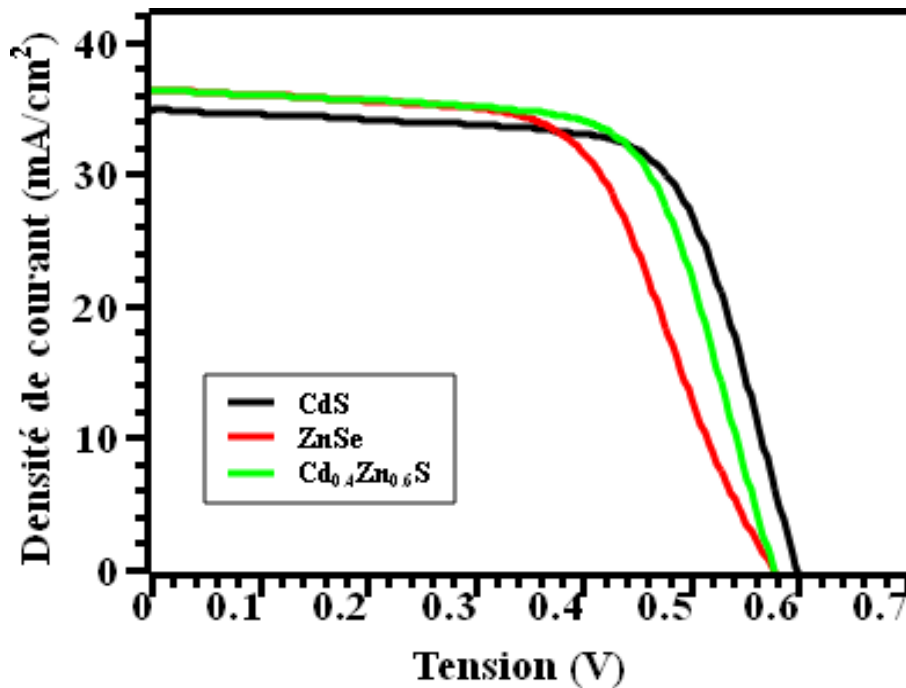


Figure III.6 : Les caractéristiques J(V) de la cellule solaire à base de CZTSSe pour les trois couches tampons après l'optimisation.

Les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire à base de CZTSSe pour différents couches tampons avant et après l'optimisation sont présentées dans le (tableau III.7). Nous remarquons que la meilleure performance est obtenue avec le CdS en tant que couche tampon avec un rendement de 14.37 %, ($V_{co} = 0.5987V$, $J_{cc} = 34.82 \text{ (mA/m}^2\text{)}$ et $FF = 68.95\%$).

Tableau III.7: Paramètres photovoltaïques optimaux des trois structures avant et après l'optimisation.

Structure	Avant l'optimisation				Après l'optimisation			
	Voc(V)	Jcc (mA/cm ²)	FF(%)	η (%)	Voc(V)	Jcc (mA/cm ²)	FF(%)	η (%)
ZnSe/CZTSSe	0.5272	36.18	60.61	11.56	0.5812	36.29	60.12	12.68
Cd _{0.4} Zn _{0.6} S/CZTSe	0.5278	36.19	65.34	12.48	0.5818	36.30	66.98	13.90
CdS/CZTSSe	0.5278	36.19	65.95	12.60	0.5987	34.82	68.95	14.37

III.6 Effet du contact arrière sur les performances de la cellule solaire en CZTSSe

Afin de voir l'effet du contact arrière sur les paramètres photovoltaïques V_{co} , J_{cc} , FF, η des cellules solaires étudiées, on va changer le métal du contact arrière (Al, Ag, Os, Zn, Mo, Co, W, Ni, Pd, Pt, Re, Ir). Pour mener cette étude dans le logiciel SCAPS, nous allons varier le travail de sortie du contact arrière dans l'intervalle de (4.41-5.76) eV. Nous utilisons les paramètres de la structure optimale obtenus par notre simulation.

L'effet du travail de sortie du contact arrière sur les performances de la cellule solaire CZTSSe pour différentes couches tampons est illustré dans la (figure III.7).

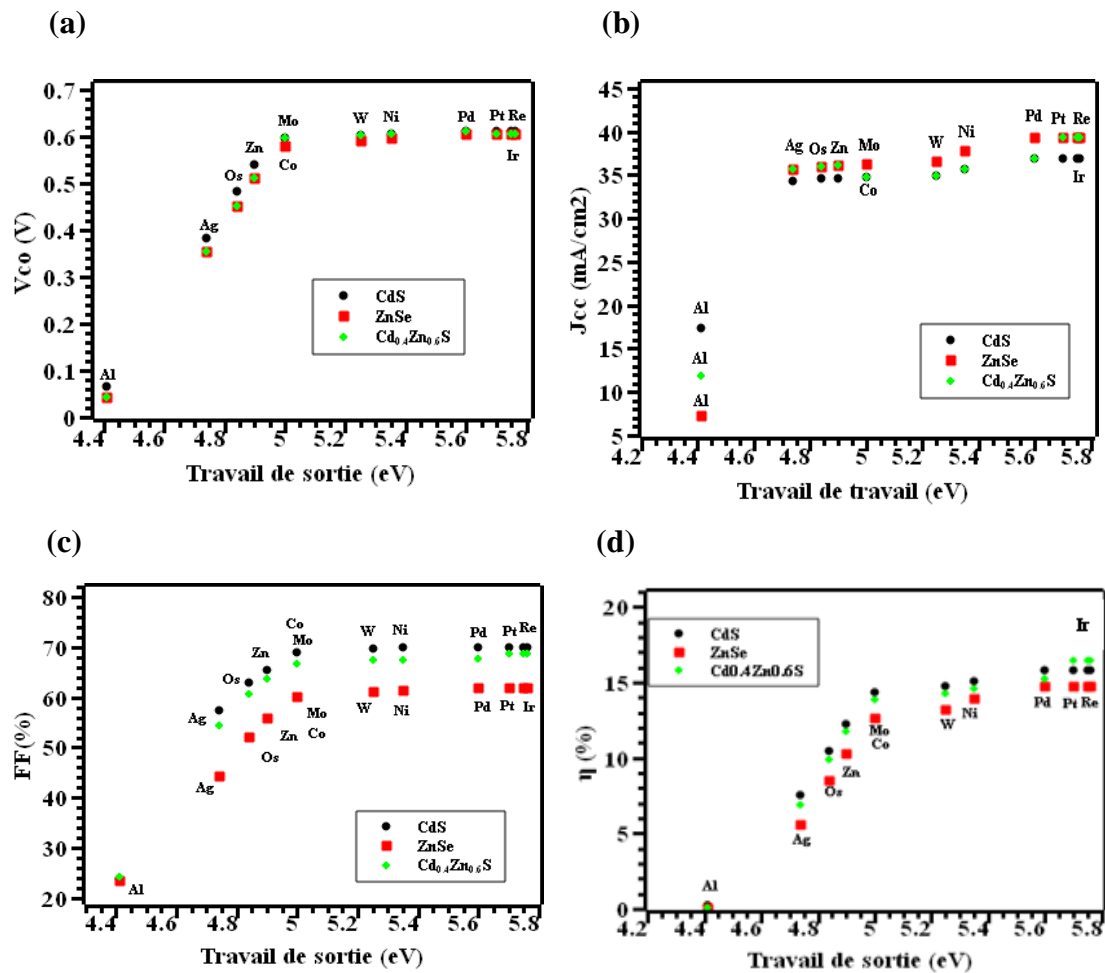


Figure III.7 : Effet du travail de sortie de contacte arrière sur les paramètres externes : (a) V_{co} , (b) J_{cc} , (c) FF et (d) η .

Chapitre III : Résultats et discussions.

Dans cette figure, nous observons que tous les paramètres externes de CZTSSe augmentent quand le travail de sortie augmente mais au-delà de 5eV les paramètres semblent stables. Nous remarquons que le $\text{Cd}_{0.4}\text{Zn}_{0.6}\text{S}$ le plus performant que le CdS pour les métaux (Pt, Re, Ir). Les meilleurs rendements sont obtenus par les métaux (Pt, Re, Ir).

III.7 L'effet de la température

Les cellules solaires sont sensibles à la température. Nous allons vérifier les performances des cellules solaires à couches minces à base de CZTSSe pour trois différentes couches tampons (CdS, ZnSe et $\text{Cd}_{0.4}\text{Zn}_{0.6}\text{S}$) et nous ferons varier la température entre 298K et 333K, en conservant les mêmes paramètres physiques de la cellule solaire optimale. Les caractéristiques $J(V)$ des trois structures sont présentées par la (figure III.8).

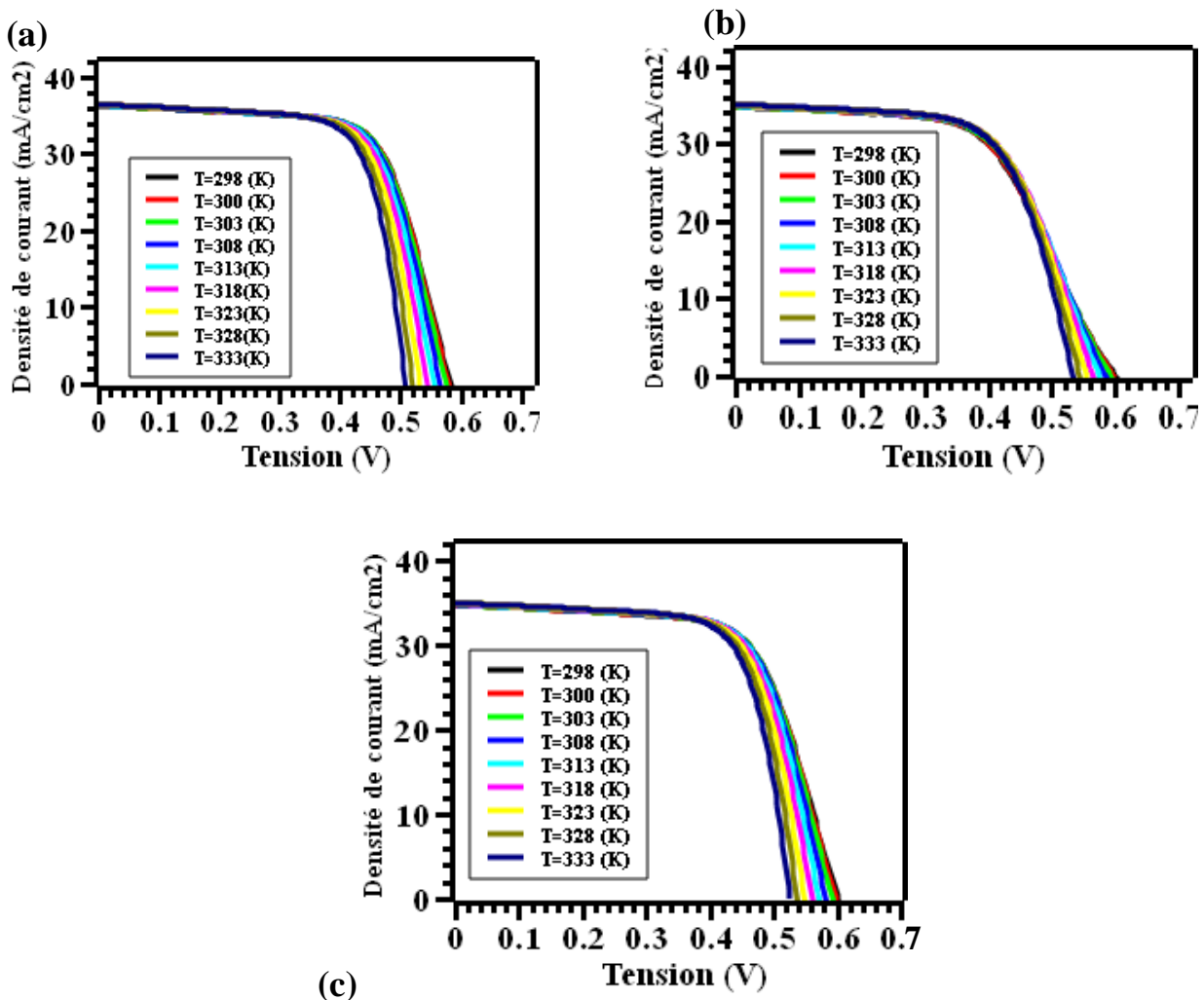


Figure III.8 : Effet de la température sur les caractéristiques $J(V)$ de la cellule solaire à base de CZTSSe pour différentes couches tampons :(a) CdS, (b) ZnSe (c) $\text{Cd}_{0.4}\text{Zn}_{0.6}\text{S}$.

Chapitre III : Résultats et discussions.

Nous remarquons que la densité de courant augmente légèrement avec la température ; par contre, la tension en circuit ouvert diminue. Il en résulte une réduction de la puissance maximale disponible.

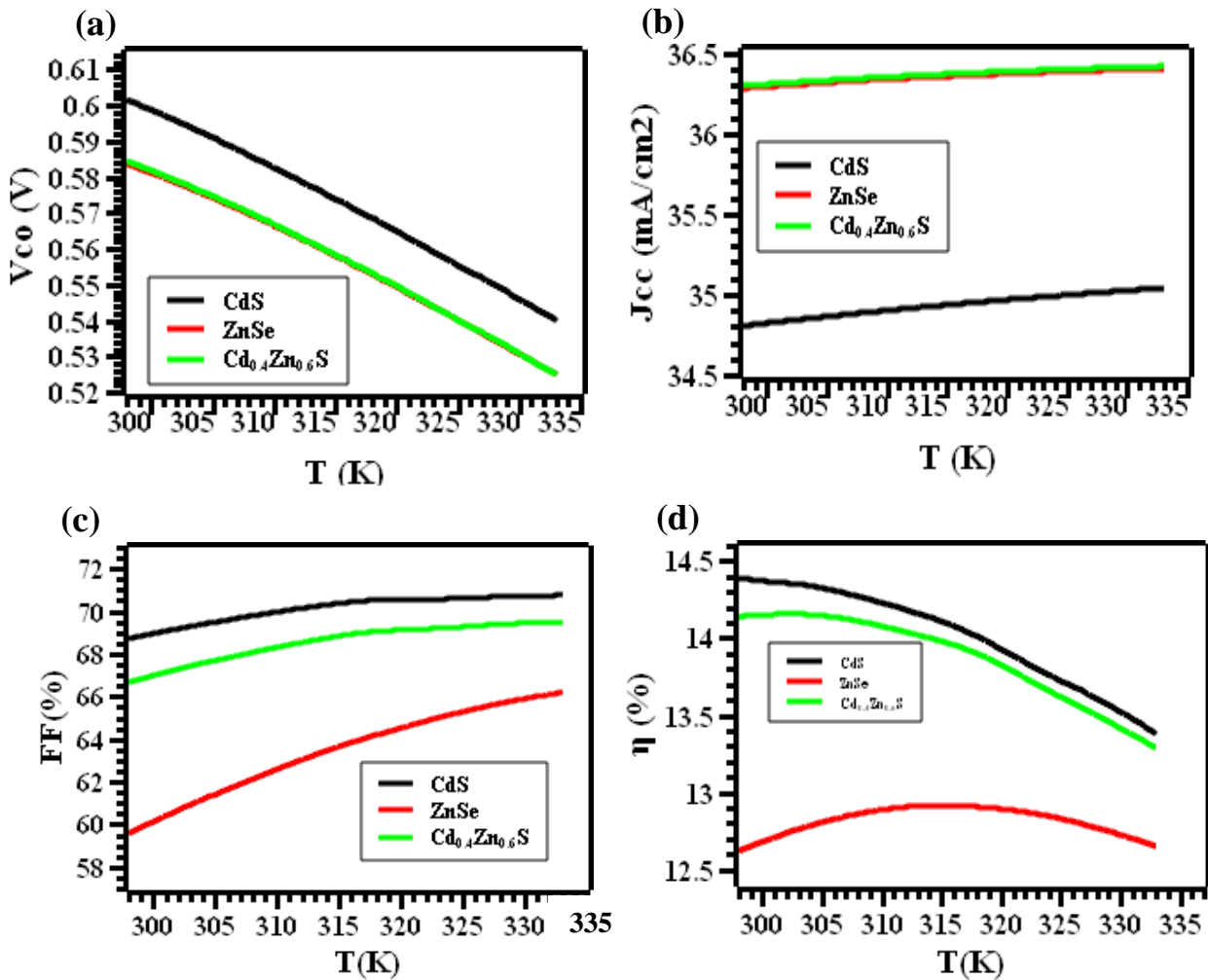


Figure III.9 :Effet de la température sur les paramètres externes : (a) V_{co} , (b) J_{cc} , (c) FF et(d) η .

Dans la (figure III.9) (a), la tension en circuit ouvert se dégrade linéairement avec l'augmentation de la température. Dans, la (figure III.9) (b), on note qu'une augmentation de la température se traduit par une légère augmentation de J_{cc} (presque constante).

Dans la (figure III.9) (c), nous remarquons que lorsque la température augmente, le facteur de forme augmente légèrement.

Chapitre III : Résultats et discussions.

Dans la (figure III.9) (c), on remarque une nette diminution du rendement pour les deux couches (CdS et ZnSe). Lorsque la température augmente, la bande de gap devient plus étroite et ceci accélère le phénomène de recombinaison des paires électrons-trous entre la bande de conduction (BC) et la bande de valence (BV). Les électrons dans la cellule solaire gagnent plus d'énergie et deviennent par-là plus instables et plus susceptibles à se recombiner avec les trous avant d'atteindre la zone de charge d'espace et être collectés [19]. Mais par rapport à $\text{Cd}_{0.4}\text{Zn}_{0.6}\text{S}$ on voit une légère augmentation jusqu'à la température 315 k après cette valeur il diminue.

III.8 Conclusion

Les conceptions de cellules solaires nécessitent de nombreuses spécifications qui doivent être respectées pour garantir l'obtention du rendement électrique le plus élevé. Dans ce chapitre, le logiciel SCAPS-1D a été utilisé pour optimiser les performances des cellules solaires à base de CZTSSe. Nous avons étudié l'effet du dopage, de l'épaisseur, de l'énergie de gap, de la température et du travail de sortie du contact arrière sur les paramètres électriques de la cellule solaire CZTSSe pour différentes couches tampons.

Conclusion Générale

Conclusion générale

L'objectif de ce travail est axé sur la simulation d'une cellule solaire photovoltaïque en couches minces à base de $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}, \text{Se})_4$ en utilisant le logiciel SCAPS-1D afin d'améliorer le rendement de conversion de cette cellule.

Ce travail a été guidé par deux idées principales, d'une part la simulation de la cellule solaire de référence avec différentes couches tampons et d'autre part l'optimisation des paramètres de la couche absorbante CZTSSe pour avoir un meilleur rendement.

En premier lieu, nous avons défini la structure de la cellule solaire de référence, ensuite nous avons calculé à l'aide de la simulation les paramètres électriques qui caractérisent cette cellule solaire. Les valeurs de ces paramètres sont : la densité du courant de court-circuit ($\mathbf{J_{CC} = 36.19\text{mA/cm}^2}$), la tension en circuit ouvert ($\mathbf{V_{co} = 0.52\text{V}}$), le facteur de forme ($\mathbf{FF = 65.95\%}$) et le rendement de conversion ($\mathbf{\eta = 12.60\%}$). Ces valeurs sont en très bon accord avec celles trouvées dans la littérature [2].

Nous avons ensuite étudié la sensibilité des paramètres photovoltaïques de la cellule solaire aux grandeurs (épaisseur, dopage, énergie de gap) de la couche CZTSSe de type p et aussi la sensibilité à la température de l'environnement et au travail de sortie du contact arrière.

Les résultats obtenus ont montré que :

- Les performances de la cellule augmentent avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche absorbeur CZTSSe pour les trois couches tampons et la valeur optimale dans notre étude est $2.5 \mu\text{m}$.
- Les caractéristiques des matériaux semiconducteurs sont fortement influencées par la concentration du dopage. Dans notre cas, nous avons $N_{A/CZTSSe/CdS} = 2.10^{16}\text{cm}^{-3}$, $N_{A/CZTSSe/ZnSe} = 1.10^{16}\text{cm}^{-3}$ et $N_{A/CZTSSe/Cd_{0.4}Zn_{0.6}S} = 1.10^{16}\text{cm}^{-3}$.
- L'augmentation de l'énergie de gap de la couche CZTSSe mène à une dégradation des performances de la cellule. L'énergie de gap optimale pour la meilleure performance est 1.1 eV
- Le contact arrière a des effets sur les performances photovoltaïques de la cellule solaire.
- La température influe beaucoup plus sur la tension de circuit-ouvert c-à-d'elle influe aussi sur le facteur de forme et le rendement.

La présente étude révèle également que le CdS est un meilleur choix pour la fabrication de la couche tampon dans les cellules solaires CZTSSe.

Bibliographique

- [1] L.Balamine, Amélioration des performances de la cellule solaire composée d'alliage de type k esterite en couche mince, m emoire de Master, Universit e Saad Dahlab Blida 1, 2021.
- [2] W. Wang, M. T. Winkler, O. Gunawan, T. Gokmen, T. K. Todorov, Y. Zhu, D. B. Mitzi, «Device characteristics of CZTSSe thin-film solar cells with 12.6% efficiency», Adv Energy Mater 4 (2014) 1301465.
- [3] B.Mhenna, Alimentation d'un moteur   courant continu par une source photovolta ique, m emoire de Master, Universit e Mouloud Mammeri De Tizi-Ouzou, 2018.
- [4] www.glastroesch.com/ch/fr/services/connaissances-specialisees/le-verre-et-ses
- [5] N.Oleksiy, Simulation, fabrication et analyse de cellule photovolta ique   contacte arri eres interdigi es, Th ese de doctorat, L'institut national des sciences appliqu ees de Lyon, 2005.
- [6] K.Manallah, Etude de l'Efficacit e de Rendement des Cellules Solaires sur la base des Mesures Photo acoustiques, Doctorat, Universit e Ferhat Abbas – S etif- SETIF ,2021.
- [7] J.I. Pankove, Optical Processes in Semiconductors, Dover, 1975
- [8] S.Guitouni , «  laboration et  tude de structure   base de couche mince de ZnO et de chalcog ennures (CIS, CZTS) pour des applications photovolta iques », Th ese de doctorat. Universit e des fr eres mentouri-Constantine 1,2017.
- [9]V.Foncrose, Nanocristaux, films et cellules photovolta iques de Cu₂ZnSn(S,Se)₄ par impression d'encre, Doctorat, l'Universit e Toulouse 3 Paul Sabatier, 2015.
- [10] O.Daranfed, Elaboration et caract erisation de couches absorbantes des cellules solaires en couches minces   base de Cu₂ZnSnS₄, th ese DOCTORAT, Universit e Mentouri De Constantine 1, 2013.
- [11] C.Gougoud, Synth ese de couches minces de k esterite Cu₂ZnSn(S,Se)₄ par  lectro d ep ot en une d'alliages Cu-Sn-Zn et recuit pour applications photovolta iques, Doctorat, L'universit e pierre et marie curie , 2013.
- [12] S.Siebentritt and S. Schorr. k esterites a challenging material for solar cells. Progress in Photovoltaics: Research and Applications, 20(5):512–519, 2012.
- [13] S.Chen, X.G.Gong, A.Walsh, and S-H.Wei. Electronic structure and stability of quaternary chalcogenide semiconductors derived from cation cross-substitution of II-VI and I-III-VI₂ compounds. Physical Review B, 79(16):165211, 2009.
- [14] R.N. Hall. « Electron-hole recombination in germanium. » Physical Review, 87(2):387, 1952.

[15] Kesterite-left-and-stannite-right-structures-of-CZTS-material-Reprinted
with_fig2_35786

[16] H. Katagiri, K. Jimbo, W. Shwe Maw, K. Oishi, M. Yamazaki, H. Araki, A. Takeuchi, Development of CZTS-based thin film solar cells. *Thin Solid Films*, 517(7):2455–2460, (2009).

[17] A. Nagoya, R. Asahi, et G. Kresse, « First-principles study of $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ and the related band offsets for photovoltaic applications », *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 23, p. 4203, 2011.

[18] M. Patelet, A. Ray, « Enhancement of output performance of $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ thin film solar cells—A numerical simulation approach and comparison to experiments », *Physica B: Condensed Matter*, vol. 407, p. 4391, 2012.

[19] K. M'rabti, Etude des performances d'une cellule solaire en couche mince à base de $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}, \text{Se})_4$, Mémoire de master, Université de Saad Dahlab Blida 1, 2020.

[20] Adnane, M., Hamzaoui, S., Mostapha, B., amp; Toufik, S, Elaboration et caractérisation des couches minces conductrices et transparentes pour les cellules solaire de type TCO / ZnS / CIS, (2011).

[21] A. Belalem, Simulation d'une cellule solaire photovoltaïque à base de $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}, \text{Se})_4$, Mémoire de master, Université kasdilerbah Ouargla, 2017.

[22] M. Buffiers, Synthèse et caractérisation de couches minces de Zn(O,S) pour application au sein des cellules solaires à base de $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$, HAL open science, 2013.

[23] S. Chen, L. Wang, X. G. Gong, A. Walsh, S. H. Wei, *Appl. Phys. Lett.*, 101(2012), pp. 223901.

[24] H. Katagiri, K. Jimbo, W.-S. Maw, K. Oishi, M. Yamazaki, H. Araki, and A. Takeuchi, « Development of CZTS-based thin film solar cells. *Thin Solid Films* » 517(7):2455–2460, 2009.

[25] G. Altamura, « Développement de cellules solaires à base de couche minces CZTSSe », thèse de doctorat, Université de Grenoble France (2014).

[26] S. Lemiti, Etude et Simulation numérique d'une cellule solaire en couche mince à base de CZTSSe, mémoire de Master, Université Saad Dahleb Blida 1, 2016.

[27] H. Katagiri, N. Sasaguchi, S. Hando, S. Hoshino, J. Ohashi, T. Yokota, « Solar Energy Materials & Solar Cells », article Vol 49 pp. 407-414 (1997).

- [28] Y. Sayade, «Détermination de la longueur de diffusion des porteurs de charge minoritaires dans le silicium cristallin par interaction lumière matière», thèse de doctorat, Institut National des Sciences appliquées de Lyon, 2009.
- [29] R. T. Zaïr, C. Oudjehani, and K. Tighilt, “SCAPS Simulation for Perovskite Solar Cell,” vol. 8, p. 26, 2021, doi: 10.31875/2410-2199.2021.08.3.
- [30] G. Ben Abderrazak, Etude par simulation numérique de la Cellule solaire à base de CZTS par SCAPS, Mémoire de fin d’étude en Master, Université Med Khider Biskra, 2013-2014.
- [31] M. Burgelman, “SCAPS manual,” 2020.
- [32] N.Ghazali, Etude des propriétés physico-chimiques des matériaux semi-conducteurs ternaires, mémoire de master, Université Mohamed El Bachir Elibrahimi –Bordj Bou, 2018/2019.
- [33] B.Flèche- D. Delagnes « Energie solaire photovoltaïque » 2007.
- [34] O.K. Simya, A. Mahaboobatcha, K. Balachander, «A comparative study on the performance of Kesteritebased thin film solar cells using SCAPS Simulation program Super lattices and Microstructures» 82 (2015) 248–261.
- [35] H.Chellal et A.Selama, Etude d’une cellule solaire à base de CIGS (ZnS/CdS/ZnSe), mémoire de Master, Université Saad Dahlab de Blida, 2017-2018.
- [36] Sadanand, D.K. Dwivedi, Theoretical investigation on enhancement of output performance of CZTSSe based solar cell, Solar Energy, Solar Energy 193 (2019) 442–451.
- [37] M. Nerat, F. Smole, M. Topič, «A simulation study of the effect of the diverse valence-band offset and the electronic activity at the grain boundaries on the performance of polycrystalline Cu(In,Ga)Se₂ solar cells», Thin Solid Films 519 (2011) 7497–7502.
- [38] A. Kanevce, I. Repins, S-H Wei, « Impact of bulk properties and local secondary phases on the Cu₂ (Zn,Sn)Se₄ solar cells open-circuit voltage», Solar Energy Materials & Solar Cells 133 (2015) 119–125.
- [39] A.LAHOUËL, « Influence de la température sur les caractéristiques d’une cellule solaire à base d’InGaN » mémoire Master, Université de Tlemcen 2016.