

République algérienne démocratique et populaire  
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique  
Université Saad Dahleb Blida 1



Faculté des sciences  
Département de physique  
Mémoire de fin d'étude  
Pour l'obtention du diplôme de Master en Physique  
Option : Nano Physique

Thème :

**Amélioration du rendement des cellules solaires à base de  
CZTSSe**

Présenté par :

Meslem Imane

Bouyousfi Baya

Soutenu le 22 /10 / 2020 devant le jury composé de :

Mr. Amrane Amine	MCB	USDB	Président
Mr. Aissat Abdelkader	Professeur	USDB	Encadreur
Mr. Belgroune Nadir	MCB	USDB	Examineur

Blida 1-2019/2020-

## Remerciement

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ وَالصَّلَاةِ وَالسَّلَامِ عَلَى أَشْرَفِ الْمُرْسَلِينَ  
تَعَالَى قَالَ « فَادْكُرُونِي أَذْكُرْكُمْ وَاشْكُرُوا لِي وَلَا تَكْفُرُونَ »

*D'abord, nous remercions Dieu le tout puissant. C'est grâce à lui que Nous avons la force pour accomplir ce travail.*

*Nous adressons nos plus vifs sentiments de gratitude à mon encadreur **Pr. AISSAT Abdelkader**, pour me proposer le sujet de fin de formation et ensuite accepter la supervision, pour ses Précieux conseils, ses incessants encouragements.*

*Nous le remercions pour la Confiance qu'il m'a témoignée.*

*Nous remercions aussi **Mr. Laidouci Abdelmoumen** et **Md. Boubakeur manel**, pour ses Pour les aider et être là quand nous en avons besoin et aussi pour offrir des conseils et du soutien.*

*Nous remercions aussi Les responsables du **laboratoire n ° 16** du département Electronique pour nous offrir un environnement de travail idéal et nous permettre de l'exploiter à tout moment.*

*Remerciements vont également à tous les membres de jury Monsieur **Mr. Amrane Amine** et **Mr. Belgroune Nadir** et à tous ceux qui ont participé de près ou de loin.*

*A nos **parents**, nous disons merci beaucoup.*

*Nous sommes infiniment reconnaissants pour votre soutien et vos encouragements.*

*Nous remercions également nos frères et sœurs, ainsi que nous amis, ceux et celles-là que nous porte dans nos cœurs, Et qui m'ont toujours encouragée supporter moralement ; Ici nous terminé mais si vous n'avez pas tout là, tout peut être résumé en ces quelques mots : Merci à tous pour votre présence et votre soutien indéfectible.*

## Dédicace

*Je dédie ce modeste travail, avec tout et mon respect, à  
mon père, Khaider, et à ma mère,  
qui a toujours cru en moi, sa compassion,  
sa patience, ses soins et ses encouragements,  
Mes sœurs, **Aya** et **Siham** Et ses petites filles **Roaya** et  
**Roaa**, ma famille élargie, mes amis d'enfance et mes  
voisins,  
Toutes mes copines,  
Tous mes professeurs, Mon pays : l'Algérie, son drapeau et  
son hymne national,*

*Meslem Imane*

## Dédicace

*Je dédie ce modeste travail :*

*A l'âme de mes parents. Sans ils, je n'aurais pas atteint ce  
niveau scolaire auprès.*

*A mon **cher mari**, qui m'a encouragé et m'a soutenu  
jusqu'au dernier moment.*

*Je dédie également ce travail a tous mes frères, en  
particulier mon cher frère, **Abdelkader***

*A mes sœurs **Warda, Karima, Souad** et **Amina**,  
à tous ma famille et la famille de mon mari.*

*A mes amis et mes camarades et tous ceux qui m'ont  
soutenu de près ou de loin.*

***Bouyousfi Baya***

## ملخص:

التحويل الكهروضوئي هو عملية كهروضوئية تتضمن التفاعل بين الفوتون والإلكترون. في هذا الموضوع قدمنا دراسة حول المبدأ الفيزيائي لتشغيل الخلية الكهروضوئية على أساس CZTSSe. إن المعلمات التي حددناها للوحدة الكهروضوئية هي تيار قصر دائرة ( $J_{cc}$ )، جهد الدارة المفتوحة ( $V_{co}$ )، وعامل الشكل ( $FF$ )، وكفاءة تحويل الخلايا الكهروضوئية  $\eta$  من خلال وضع النماذج ومحاكاة الوحدة الكهروضوئية بواسطة البرنامج SCAPS-1D. مع العلم أننا استخدمنا هيكلين لإجراء هذه الدراسة، الأولى بطبقة ماصة (CZTSSe) والثانية ضمت طبقتين (Si, CZTSSe). بعد ملاحظة خصائصها ( $I-V$ ) و ( $P-V$ )، وقد تم دراسة تأثير التركيز والسلك والمنشطات وتأثير درجة الحرارة، ومقارنتها مع النتائج المتحصل عليها من التجربة التي قام بها M. Wei Wang.

كلمات مفتاحية: مواد جديدة، خلايا شمسية، كهروضوئية، إلكترونيات.

## Résumé :

La conversion photovoltaïque est un processus photo-électronique qui fait intervenir l'interaction entre un photon et un électron. Le sujet est de présenter une étude sur le principe physique de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque basé sur CZTSSe. Les paramètres externes que nous avons déterminé d'un module photovoltaïque sont le courant de court-circuit ( $J_{cc}$ ), la tension de circuit ouvert ( $V_{co}$ ), le facteur de forme ( $FF$ ) et le rendement de conversion photovoltaïque  $\eta$ , en modélisant et simulant le modèle photovoltaïque par le logiciel SCAPS-1D. Sachant que nous avons utilisé deux structures pour faire cette étude, la première avec une couche absorbante (CZTSSe) et la seconde avec deux (CZTSSe, Si), après avoir relevé leurs caractéristiques courant – tension ( $J-V$ ), puissance – tension ( $P-V$ ). On a étudié l'effet de concentration, de l'épaisseur, de dopage et l'effet de température et on compare les résultats avec les résultats expérimentaux d'autres chercheurs.

Mots Clés : Nouveaux matériaux, cellules solaires, photovoltaïque, optoélectronique.

**Abstract:**

Photovoltaic conversion is a photo-electronic process that involves the interaction between a photon and an electron. The subject is to present a study on the physical principle of operation of a photovoltaic cell based on CZTSSe. The external parameters we have determined from a photovoltaic module are short circuit current ( $J_{cc}$ ), open circuit voltage ( $V_{co}$ ), form factor (FF), and photovoltaic conversion efficiency  $\eta$ , by modeling and simulating the photovoltaic module using SCAPS-1D software. Knowing that we used two structures to do this study, the first with an absorbent layer (CZTSSe) and the second with two (CZTSSe, Si), after reading their current characteristics – voltage (J-V), power – voltage (P-V). We studied the effect of concentration, thickness, doping and the effect of temperature and compared the results with the experimental by Mr. Wei Wang.

**Keywords:** New Materials, solar cells, photovoltaic, optoelectronic.

## Table des matières

Introduction générale.....	1
<b>Chapitre I : Généralité sur les cellules photovoltaïque</b>	
I.1 Introduction .....	3
I.2 L'énergie solaire .....	3
I.2.1. Le rayonnement solaire .....	4
I.2.2. Cellule solaire .....	5
I.3. Les semi-conducteurs .....	5
I.4. Effet photovoltaïque.....	6
I.4.1. Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque .....	7
I.4.2. Caractéristiques de la cellule solaire .....	8
I.4.2.1. Courant de court-circuit $I_{CC}$ .....	10
I.4.2.2 Tension à circuit ouvert $V_{CO}$ .....	10
I.4.2.3 Réponse spectral $SR(\lambda)$ .....	10
I.4.2.4. Facteur de forme FF.....	10
I.4.2.5. Le rendement .....	11
I.4.2.6. Résistance série ( $R_s$ ) et résistance de court-circuit ( $R_{shunt}$ ) .....	12
I.5.Génération de cellules solaires.....	13
I.5.1. Première génération.....	13
I.5.2. Deuxième génération.....	13
I.5.3. Troisième génération.....	14
I.6. Avantages et inconvénients de l'énergie photovoltaïque.....	14
I.6.1. Avantages de l'énergie photovoltaïque.....	14
I.6.2. Inconvénients de l'énergie photovoltaïque.....	14
I.7. Les cellules organiques.....	14
I.8. Généralité sur les couches mince.....	15
I.8.1. Définition d'une couche mince.....	15
I.8.2. La filière couches minces.....	16
I.9. Différents types de filières technologiques des cellules photovoltaïques.....	16
I.10. Énergie gap direct et indirect.....	17
I.10.2. Les semi-conducteurs à gap indirect.....	17
I.10.1. Les semi-conducteurs à gap direct.....	17
I.11.conclusion.....	18

## Chapitre II : Caractéristique de matériaux CZTSSe

II.1. Introduction .....	20
II.2. Principe de la simulation numérique.....	20
II.2.1. Présentation du logiciel de simulation SCAPS.....	21
II.3. Structure cristalline de CZTSSe.....	22
II.4. Les avantages et les inconvénients de CZTSSe.....	23
II.4.1. Les avantages.....	23
II.4.2. Les inconvénients.....	23
II.5. Structures de cellule solaire.....	23
II.5.1 Couche absorbante CZTSSe .....	23
II.5.2. Couche de fenêtre.....	24
II.5.3. Le contact avant.....	24
II.5.4. Contact arrière.....	24
II.5.5. Couche tampon.....	24
II.6. Structure et paramètres de cellule étudiée.....	24
II.6.1. Structure cellules étudiée.....	24
II.6.2. Structure de bande de CZTSSe .....	25
II.6.3. Structure électronique .....	26
II.7. Les paramètres électroniques et optiques.....	27
II.7.1. Les paramètres électroniques .....	27
II.7.1.1. Paramètre de maille.....	27
II.7.1.2. La couche contrainte.....	28
II.7.1.3. Epaisseur critique De structure Cds/CZTSSe.....	31
II.7.2. Les propriétés optiques.....	32
II.7.2.1. Energie de bandes.....	32
II.7.2.2 les interactions rayonnement matière .....	33
II.7.2.2.1 L'absorption .....	34
II.7.2.2.2 Réfraction.....	36
II.7.2.2.3. Réflexion.....	37
II.7.2.2.4. Transmission .....	39
II.8. Le deuxième Couche absorbante de silicium.....	40
II.8.1 Structure cellules étudiée avec la couche de silicium.....	40
II.8.2. Diagramme de bande de Si .....	40
II.8.3. Propriétés électrique de structure Cds/CZTSSe/Si .....	41



II.8.3.1 Contraint de structure CdS/CZTSSe/Si .....	41
II.8.2.1 Epaisseur critique De structure CdS/CZTSSe/Si.....	42
II.9. Conclusion .....	42

### **Chapitre III : Résultat et discussion**

III.1. Introduction .....	44
III.2 Paramètres utilisés dans la simulation .....	44
III.2.1 Paramètres de matériau utilisé dans cette simulation .....	45
III.3. Effet de la concentration de sulfure sur les caractéristiques de la structure CdS/CZTS <sub>x</sub> Se <sub>1-x</sub> .....	45
III.3.1. Effet de la concentration de sulfure sur le rendement quantique externe de la structure CdS /CZTS <sub>x</sub> Se <sub>1-x</sub> .....	46
III.3.2. Variation de caractéristique J-V de la structure CdS/ CZTS <sub>x</sub> Se <sub>1-x</sub> en fonction de la concentration du sulfure.....	47
III.3.3. Variation de caractéristique P-V de la structure CdS/ CZTS <sub>x</sub> Se <sub>1-x</sub> en fonction de la concentration du sulfure.....	49
III.4 Effet de l'épaisseur sur les caractéristiques de la structure CdS/CZTS <sub>x</sub> Se <sub>1-x</sub> .....	50
III.4.1 Effet de l'épaisseur sur le rendement quantique externe de la structure CdS/CZTS <sub>x</sub> Se <sub>1-x</sub> .....	50
III.4.2 Effet de l'épaisseur sur les caractéristiques J-V de la structure CdS /CZTS <sub>x</sub> Se <sub>1-x</sub>	51
III.4.3 Effet de l'épaisseur sur les caractéristiques P-V de la structure CdS /CZTS <sub>x</sub> Se <sub>1-x</sub>	53
III.5 Effet de Température sur caractéristique de la structure CdS / CZTS <sub>x</sub> Se <sub>1-x</sub> .....	54
III.5.1 Effet de Température sur rendement quantique externe de la structure CdS / CZTS <sub>x</sub> Se <sub>1-x</sub> .....	54
III.5.2 Effet de température sur les caractéristiques J-V de la structure CdS / CZTS <sub>x</sub> Se <sub>1-x</sub> .....	55
III.6 Effet de dopage sur les caractéristiques J-V de la structure CdS / CZTS <sub>x</sub> Se <sub>1-x</sub> pour x=0.3 et T=300K.....	57
III.7. Validations des résultats de la structure CdS / CZTS <sub>x</sub> Se <sub>1-x</sub> avec références.....	59
III.8 Effet de la couche de p-Si sur les performances des cellules solaires CZTSSe.....	61
III.9 Conclusion .....	62
Conclusion général.....	65
Les références .....	66
Annexe.....	72

## Liste des tableaux

<b>Tableau II.1</b> : paramètre de structure ZnO/CdS/CZTSSe/Si.....	27
<b>Tableau III.1:</b> Paramètres de matériau utilisés dans cette simulation.....	44
<b>Tableau III.2:</b> Résultats finals de l'effet de la concentration de sulfure sur la structure CdS/ CZTS <sub>x</sub> Se <sub>1-x</sub> .....	45
<b>Tableau III.3:</b> Résultats finals de l'effet de la concentration de sulfure sur la structure CdS/ CZTS <sub>x</sub> Se <sub>1-x</sub> .....	45
<b>Tableau III.4:</b> Résultats finals de l'effet de l'épaisseur sur la structure CdS/ CZTS <sub>x</sub> Se <sub>1-x</sub> pour x=0.3.....	50
<b>Tableau III.5</b> Résultats finals de l'effet de la température T sur la structure CdS/CZTS <sub>x</sub> Se <sub>1-x</sub> pour x=0.3 avec ε <sub>xx</sub> = 3.7 %.....	54
<b>Tableau III.6</b> : effet dopage de structure CdS/CZTSSe pour x=0.3.....	57
<b>Tableur III.7:</b> Résultat de simulation de structure ZnO/CdS/CZTSSe.....	60
<b>Tableaux III.8</b> : Résultats final de simulation pour la structure étude avec et sans Si.	62

## Listes des acronymes et abréviations :

Acronymes	Signification	Unité
CZTS	$\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$	
CZTSe	$\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$	
$J_{sc}$	Courant de court-circuit	A
$V_{co}$	Tension de circuit ouvert	V
$\eta$	Rendement électrique	%
FF	Facteur de forme	%
$P_m$	Puissance maximale	$\text{W. m}^{-2}$
$\Lambda$	Longueur d'onde	Nm
$\phi$	L'éclairement	$\text{W. cm}^{-2}$
$h$	Constante de Planck	J.s
$c$	Vitesse de lumière	m/s
$T$	Température	K
$I$	Courant	A
$I_m$	Courant maximale	A
$V_m$	Tension maximale	V
$Q$	Charge élémentaire	C
$I_{ph}$	Photo-courant	A
$I_0$	Courant inverse de saturation	A
$k$	Constante de Boltzmann	$\text{eV. K}^{-1}$
$R_s$	Résistance en série	$\Omega$
$R_{sh}$	Résistance shunt	$\Omega$
$I_D$	Courant de diode	A
$A$	Coefficient d'absorption	$\text{cm}^{-1}$
$E_g$	Energie de bandes	eV
$\chi_e$	Affinité électronique	eV
$\epsilon$	Permittivité diélectrique	Relative
$I_{obs}$	Le courant d'obscurité	A
$I_s$	Le courant de saturation de la diode	A
EQE	Rendement quantique externe	%
IQE	Le rendement quantique interne	%
$a_e$	Paramètre de maille épitaxie	$\text{\AA}$
$a_s$	Paramètre de maille de substrat	$\text{\AA}$
$h_c$	Epaisseur critique	%

## Liste des figures

<b>Figure I.1</b> : L'énergie solaire.....	4
<b>Figure I.2</b> : Spectre électromagnétique.....	4
<b>Figure I.3</b> : coupe d'une cellule photovoltaïque .....	5
<b>Figure I.4</b> : Représentation des bandes d'énergie.....	6
<b>Figure I.5</b> : Principe de la conversion photovoltaïque dans les cellules photovoltaïques.....	6
<b>Figure I.6</b> : Schéma de principe et diagramme de bande d'une jonction PN.....	8
<b>Figure I.7</b> : <b>Caractéristique</b> courant-tension d'une cellule .....	9
<b>Figure I.8</b> : Schéma équivalent d'une cellule PV idéale.....	9
<b>Figure I.9</b> : Circuit équivalent d'une cellule photovoltaïque.....	12
<b>Figure I.10</b> : Cellule solaire tout organique sur substrat souple.....	15
<b>Figure I.11</b> : Schéma représente quelque couche mince.....	16
<b>Figure I.12</b> : Parts de marché des différentes technologies solaires .....	17
<b>Figure I.13</b> : Schéma de semi-conducteur à gap direct et indirect .....	18
<b>Figure II.1</b> : Panneau de démarrage de SCAPS, le panneau d'action ou principal.....	20
<b>Figure II.2</b> : Les familles de semi-conducteurs dont le CZTSSe est issu .....	22
<b>Figure II.3</b> : <b>Structures</b> cristallines du $\text{Cu}_2\text{ZnSn(S, Se)}$ .....	23
<b>Figure II.4</b> : Structure étudiée de la cellule solaire simulée par logiciel SCAPS de $\text{CdS/CZTS}_x\text{Se}_{1-x}$ .....	25
<b>Figure II.5</b> : Diagramme de bande .....	26
<b>Figure II.6</b> :(a) Structure de bande électronique de CZTS. (b) Structure de bande électronique de CZTSe.....	27
<b>La figure II.7</b> : représente la variation de paramètre de maille en fonction de la concentration de sulfure de CZTSSe.....	28
<b>Figure II.8</b> : Illustration des deux types de déformation a) Couche en tension. b) couche en compression.....	30
<b>Figure II.9</b> : représentation de la variation des déformations bi axiale $\epsilon_{xx}$ et uni axiale $\epsilon_{zz}$ .de CZTSSe en fonction de la concentration x.....	30
<b>Figure II.10</b> : l'épaisseur critique on fonction de la concentration x.....	32
<b>Figure II.11</b> : Variation de l'énergie de gap du CZTSSe en fonction de la concentration du sulfure.....	33
<b>Figure II.12</b> : les interactions rayonnement.....	34
<b>Figure II.13</b> : Le phénomène d'absorption .....	34

<b>Figure II.14 :</b> (a)variations le coefficient d'absorption $\alpha$ en fonction d'énergie de photon pour plusieurs concentration (b) variations du coefficient d'absorption $\alpha$ t l'énergie de photon en fonction de concentration pour plusieurs valeurs de longueur d'onde.....	35
<b>Figure II.15 :</b> Variation de l'indice de réfraction en fonction de la longueur d'onde pour différentes valeurs de concentration x.....	37
<b>Figure II.16:</b> Variation de coefficient de réflexion en fonction de la longueur d'onde pour des différentes valeurs de concentration x.....	38
<b>Figure II.17 :</b> variation transmission en fonction de la longueur d'onde.....	39
<b>Figure II.18 :</b> Structure étudiée de la cellule solaire simulée par logiciel SCAPS de CdS/CZTS <sub>x</sub> Se <sub>1-x</sub> /Si .....	40
<b>Figure II.19 :</b> Digramme de bande de Si.....	41
<b>Figure II.20:</b> représentation de la variation des déformations bi axiale $\epsilon_{xx}$ et uni axiale $\epsilon_{zz}$ de CZTSSe/Si en fonction de la concentration x.....	41
<b>Figure II.21 :</b> l'épaisseur critique on fonction de la concentration x de structure CdS/CZTSSe/Si.....	42
<b>Figure III.1:</b> Variation du rendement quantique externe EQE en fonction de la longueur d'onde pour différentes valeurs de concentration de sulfure.....	46
<b>Figure III.2:</b> Variation de caractéristique J-V pour différentes valeurs de concentration de sulfure.....	47
<b>Figure III.3:</b> (a) Variations la densité de courant de court-circuit et rendement en fonction de concentration de sulfure. (a) variation de tension de cout circuit et facteur de forme en fonction de concentration de sulfure.....	48
<b>FigureIII.4:</b> Variation de caractéristique P-V pour différentes valeurs de concentration sulfure.....	49
<b>Figure III.5 :</b> Variation du rendement quantique externe EQE en fonction de la longueur d'onde pour différentes valeurs de l'épaisseur pour x=0.3.....	50
<b>Figure III.6:</b> Variation de caractéristique J-V pour différentes valeurs de l'épaisseur de CdS/ CZTS <sub>x</sub> Se <sub>1-x</sub> pour x=0.3.....	54
<b>Figure III.7:</b> (c) variation de tension de court-circuit et facteur de forme en fonction de l'épaisseur de couche absorbent CZTSSe (d) variation de rendement et densité de courant de court-circuit en fonction d'épaisseur de couche absorbent pour x=0.3avec $\epsilon_{xx} = 3.7 \%$ ..	52
<b>Figure III.8 :</b> Variation de caractéristique P-V pour différentes valeurs d'épaisseur de CdS/ CZTS <sub>x</sub> Se <sub>1-x</sub> pour x=0.3.....	53

<b>Figure III.9 :</b> Variation du rendement quantique externe EQE en fonction de la longueur d'onde pour plusieurs températures set pour $x=0.3$ .....	54
<b>Figure III.10 :</b> variation du J-V pour plusieurs températures de structure $Cds/CZTS_x Se_{1-x}$ pour $x=0$ .....	55
<b>Figure III.11 :</b> (e) variation de facteur de forme et rendement. (f) variation de densité de courant de court-circuit et tension court-circuit en fonction de température.....	56
<b>Figure III.12 :</b> (g) variation de facteur de forme et le rendement en fonction de dopage de la couche absorbante. (h) variation de la densité de courant de court-circuit et la tension de circuit ouvert en fonction de dopage de la couche absorbante.....	58
<b>Figure III.13 :</b> variation le rendement quantique en fonction de longueur d'onde pour de cas simulation et expérimental de couche absorbent CZTSSe pour $x=0.3$ .....	59
<b>Figure III.14 :</b> Variation de caractéristique J-V pour $x=0.3$ de simulation et d'expérimental dans l'épaisseur de couche absorbent $2\mu m$ .....	60
<b>Figure III.15 :</b> variation de rendement quantique en fonction de la longueur d'onde avec et sans Si.....	61
<b>Figure III.16 :</b> Variation de caractéristique J-V pour $x=0.3$ avec Si et sans Si.....	62
<b>Figure A 1 :</b> Panneau de démarrage de SCAPS, le panneau d'action ou principal.....	72
<b>Figure A 2 :</b> les étapes pour trouve les graphes de J-V et P-V.....	73
<b>Figure A.3 :</b> Définition de notre structure de cellule solaire d CZTSSe/CdS/ZnO.....	73
<b>Figure A.4 :</b> Définition de notre structure de cellule solaire de Si/CZTSSe/CdS/ZnO.....	74
<b>Figure A.5 :</b> Tableau périodique des matériaux chimiques.....	75

# **Introduction**

## **générale**

## Introduction générale

L'augmentation de la population et le développement industriel ont contribué à une augmentation du besoin énergétique mondial. Elle a été répertoriée pour l'humanité pour les années prochaines et largement utilisées dans l'industrie, le transport, la communication, l'agriculture et la vie quotidienne. Elle provient sous multiples formes divisées en deux catégories principales. La première est la catégorie des énergies dites non renouvelables telle que l'extraction du charbon, du gaz, du pétrole et d'uranium. La deuxième est celle des énergies appelées renouvelables comme l'éolienne, la biomasse, la géothermique, l'hydroélectrique et le solaire thermique et photovoltaïque [1].

La meilleure façon de mieux comprendre les mécanismes de fonctionnement des dispositifs des cellules solaires tels que les courants de transport, la génération électron-trou et les phénomènes de recombinaison est la construction de modèles numériques pour la simulation. Ceci permet d'élucider les processus qui limitent les performances de la cellule et de donner une conception optimale des structures à la base de ces dispositifs [2].

L'objectif de ce présent mémoire est de faire une simulation et modélisation des cellules à base de Cds/CZTSSe: ZnO/Cds/CZTSSe, et CZTSSe/Si :Cds/CZTSSe/Si ; et nous avons étudié l'effet, de l'épaisseur, de la température , du dopage , sur les caractéristiques électriques en vue de faire par simulation en utilisant le logiciel SCAPS 1D pour simuler les caractéristiques physiques (densité de courant de court-circuit, tension de circuit ouvert  $V_{co}$  , Facteur de forme FF, le rendement de conversion de la cellule solaire étudiée ( $\eta$ )). La présentation de cette étude a été répartie sur trois chapitres avec au début une présentation générale et se termine à la fin par une conclusion générale. Le premier chapitre est une recherche bibliographique sur les cellules solaires. Dans le deuxième chapitre nous présenterons le matériau que nous étudierons, leurs composants et leurs différentes propriétés. Dans le troisième et le dernier chapitre, nous avons exécuté la simulation et discuté les résultats obtenus.



# **Chapitre I :**

# **Généralité sur les**

# **cellules solaires**

## **I.1 Introduction :**

La protection de l'environnement est devenue une préoccupation majeure de nos sociétés. De nombreuses voies de recherches se sont donc orientées vers l'utilisation des énergies propres dites renouvelables. Du côté de ces dernières, plusieurs sources ont déjà été proposées. Les deux nouvelles sources les plus répandues sont l'énergie éolienne et l'énergie solaire. Dans ce travail nous nous intéressons à cette dernière énergie.

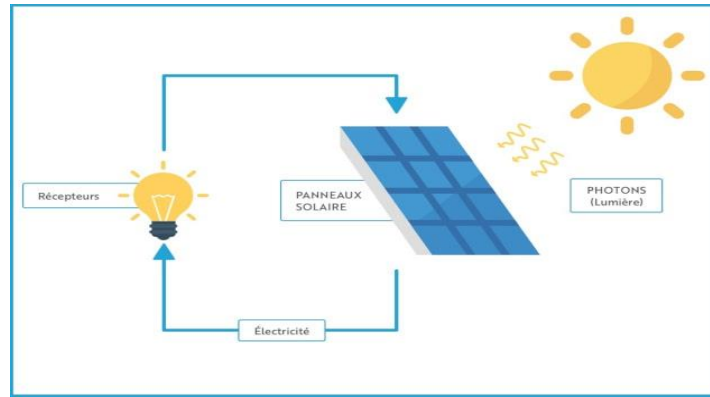
L'énergie photovoltaïque est une source d'énergie renouvelable très intéressante, dans la mesure où elle est abondante, présente sur toute la planète et gratuite. Toutes les heures le soleil fournit à la terre l'énergie dont les hommes ont besoin en 1 an. L'Agence Internationale de l'Énergie (AIE) a calculé qu'une surface de 145 000 km<sup>2</sup> (soit 4 % de la surface des déserts les plus arides) serait suffisante pour couvrir la totalité des besoins en électricité de la planète. L'énergie solaire est maintenant devenue un produit de choix pour les énergies renouvelables vu son coût qui ne cesse de baisser et sa longévité. Le photovoltaïque présente aussi plusieurs avantages tels que :

- Très longue durée de vie des panneaux solaires- 35 à 50 ans (la plupart des panneaux ont une garantie de 20 ou 25 années « au moins 80% de leur puissance nominale »)
- Pratiquement sans entretien.
- Relativement facile à installer.
- Silencieux.
- En général, ne nécessitent pas beaucoup de grand équipement, il est donc facile à installer dans des endroits éloignés [3].

## **I.2 L'énergie solaire :**

Le soleil est une petite étoile centrale du système solaire magnétiquement active, il est presque sphérique, c'est une boule de gaz et de plasma [4].

L'énergie solaire est une source d'énergie qui dépend du soleil. Cette énergie permet de fabriquer de l'électricité à partir de panneaux photovoltaïques ou des centrales solaires thermiques, grâce à la lumière du soleil captée par des panneaux solaires.

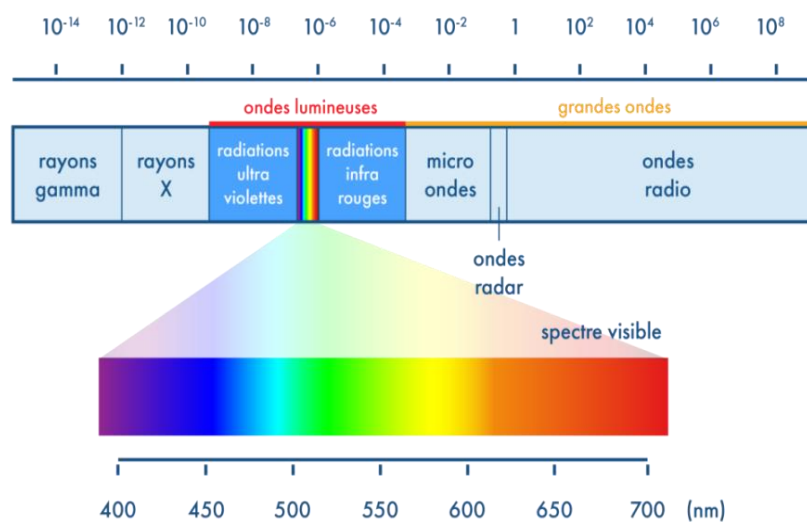


**Figure I.1 : L'énergie solaire [5].**

### I.2.1. Le rayonnement solaire :

Le soleil émet de l'énergie dans toutes les directions, et la Terre intercepte et reçoit une partie de cette énergie. Le flux de puissance atteignant le sommet de l'atmosphère de la Terre est d'environ 1400 watts / m<sup>2</sup>. L'atmosphère relativement dense de la Terre filtre environ 400W/m<sup>2</sup>, y compris la plupart des rayons ultraviolets.

Les rayonnements émis sont de type électromagnétique. Ils constituent un spectre continu allant des ultra-violets à l'infrarouge en passant par le visible ou il émet avec le maximum d'intensité. Les rayons solaires prennent 8.33 minutes pour arriver à la terre puis qu'ils se propagent à une vitesse de  $3 \times 10^5$  km s<sup>-1</sup> et la distance entre la terre et le soleil  $15.9 \times 10^6$  km [4].

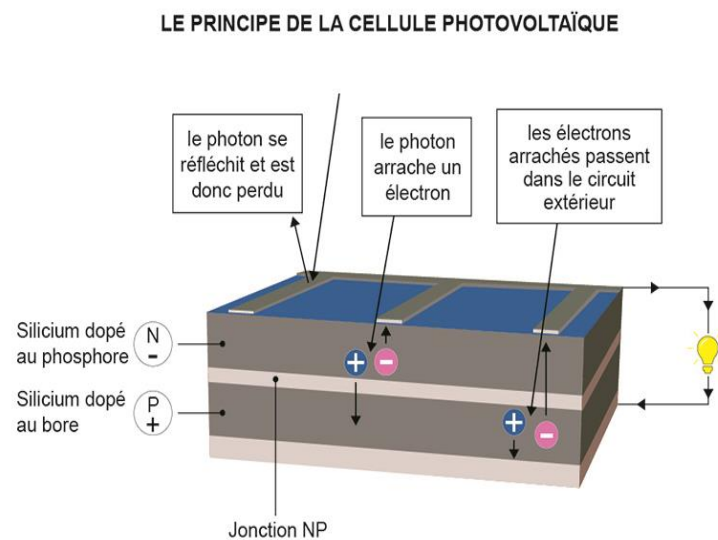


**Figure I.2 : Spectre électromagnétique [7].**

### I.2.2. Cellule solaire :

La cellule PV, aussi appelée cellule solaire, constitue l'élément de base de la conversion photovoltaïque. Il s'agit d'un dispositif semi-conducteur qui transforme en énergie électrique l'énergie lumineuse fournie par une source d'énergie inépuisable, le soleil. Elle exploite les propriétés des matériaux semi-conducteurs utilisés dans l'industrie de l'électronique : diodes, transistors et circuits intégrés.

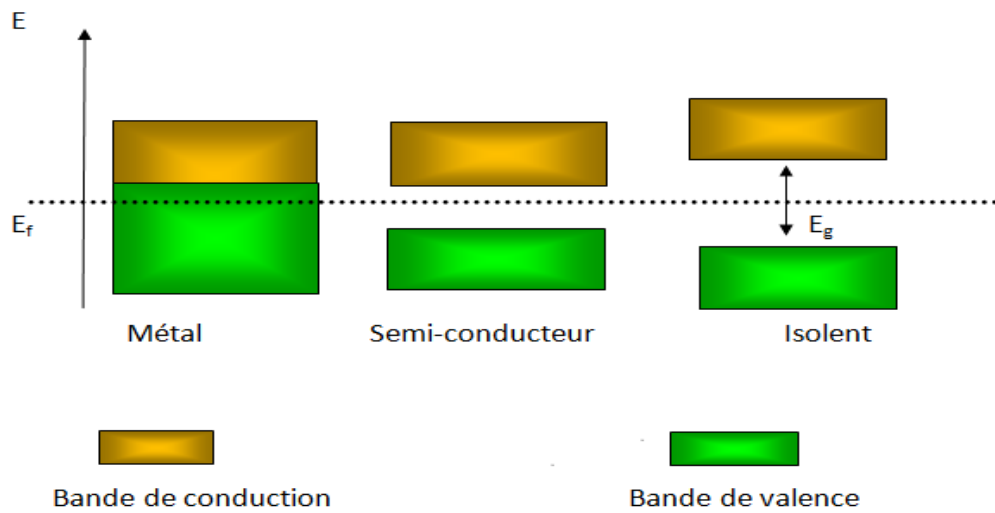
Le terme « photovoltaïque » désigne le processus physique qui consiste à transformer l'énergie lumineuse en énergie électrique par le transfert de l'énergie des photons aux électrons d'un matériau [6].



**Figure I.3 :** coupe d'une cellule photovoltaïque [9].

### I.3. Les semi-conducteurs :

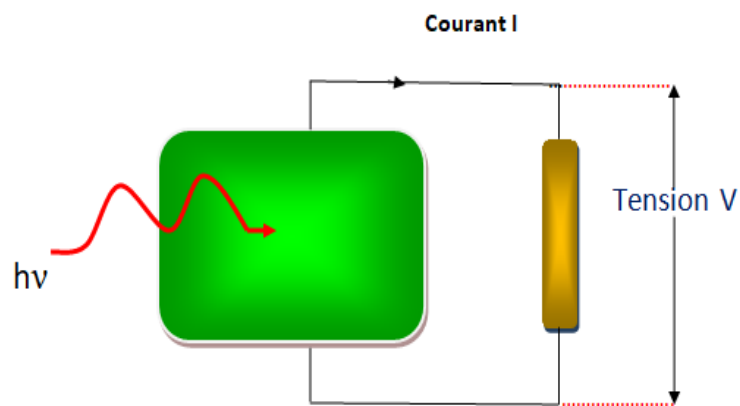
Un semi-conducteur (SC) est un matériau présentant une bande interdite ( $E_g$ ) de quelques eV entre la bande de valence (BV) et la bande de conduction (BC), avec le niveau de Fermi dans la bande interdite [8]. Il y a trois groupes de matériaux solides les conducteurs, les semi-conducteurs et les isolants.



**Figure I.4:** représentation des bandes d'énergie [10]

#### I.4. Effet photovoltaïque :

L'effet photovoltaïque utilisé dans les cellules solaires permet de convertir directement l'énergie lumineuse des rayons solaires en électricité par la production et le transport, dans le semi-conducteur, de charges électriques positives et négatives sous l'effet de la lumière.



**Figure I.5 :** Principe de la conversion photovoltaïque dans les cellules photovoltaïques [11].

### **I .4.1. Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque**

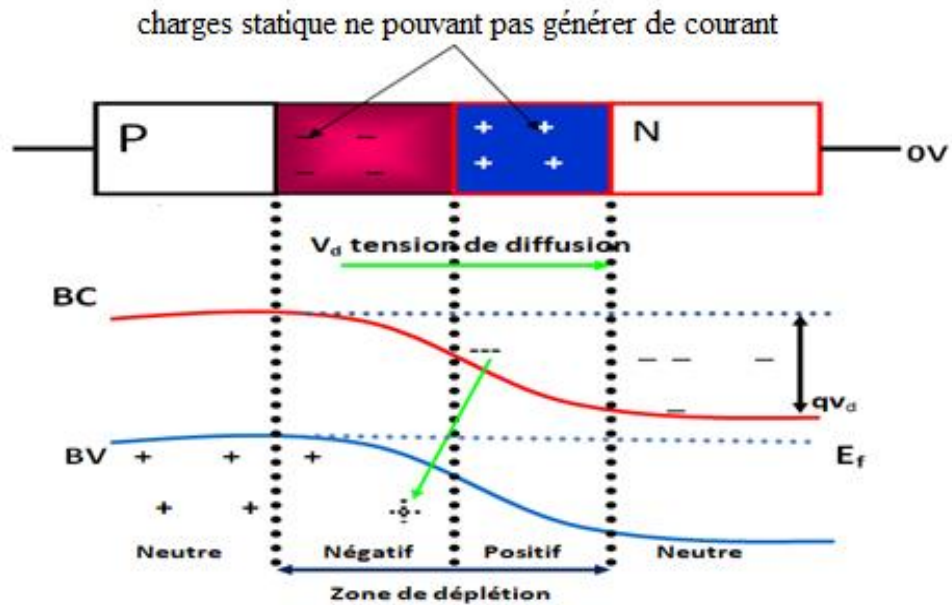
La cellule solaire est une photodiode à jonction PN de grande surface qui génère un signal électrique sans l'aide d'une source d'énergie auxiliaire. Lorsque les photons issus du soleil frappent la cellule, certains sont réfléchis et d'autres sont transmis ou absorbés dans la cellule solaire, seuls les photons absorbés participent à l'effet photoélectrique. La conversion photovoltaïque met en jeu trois phénomènes physiques, intimement liés et simultanés :

- L'absorption de la lumière dans le matériau,
- Le transfert d'énergie des photons aux charges électriques,
- La collecte des charges [10], Les cellules solaires sont basées sur la technique des semi-conducteurs et la jonction p-n.

La position du niveau de Fermi est fonction de la concentration des porteurs de charges. Le semi-conducteur est de type n lorsque les électrons sont les porteurs de charge majoritaires, dans ce cas, le niveau de Fermi se situe près de la bande de conduction. Il est de type p lorsque ce sont les trous, dans ce cas le niveau de Fermi est proche de la bande de valence [11].

Alors que, pour un semi-conducteur de type p, les trous sont majoritaires, et donc, le niveau de Fermi est proche de la bande de valence. Lors du contact entre les zones p et n, les porteurs majoritaires de chacun se propagent à travers la surface de contact, il se crée une zone chargée positivement du côté de la région n et une zone chargée négativement du côté de la région p. Cette zone de transition est appelée zone de charge d'espace (ZCE) ou bien la zone de déplétion. Le gradient de concentration des porteurs majoritaires induit la présence d'un champ électrique permanent dans cette ZCE à l'équilibre. Les niveaux de Fermi des deux zones s'égalisent, ce qui provoque une courbure du diagramme de bande, introduisant une barrière de potentiel à l'interface [12].

Une jonction p-n 'est pas formée par un semi-conducteur de type p et de type n. Lorsque les deux semi-conducteurs sont du même matériau, c'est l'homo jonction comme le cas des cellules à base de silicium. Par contre, l'hétérojonction c'est la jonction formée par deux matériaux semi-conducteurs différents [11]. Le principe de la jonction est présenté dans la figure (I.6).



**Figure I.6 :** Schéma de principe et diagramme de bande d'une jonction P-N

Charges statiques ne pouvant pas générer de courant

#### I.4.2. Caractéristiques de la cellule solaire :

Une cellule solaire à une relation avec la résistance électrique et soumise à l'éclairement solaire débite un courant qui va se répartir entre la résistance et sa structure interne de diode. Sa caractéristique le  $I(V)$  correspond à la soustraction du photo courant et du courant de la diode à l'obscurité par [13] :

$$I(V) = I_{\text{abs}}(V) - I_{\text{ph}} = I_s e^{\frac{qV}{kT} - 1} - I_{\text{ph}} \quad (\text{I.1})$$

avec:

$I_{\text{ph}}$ : le phot courant.

$I_{\text{obs}}$ : le courant d'obscurité.

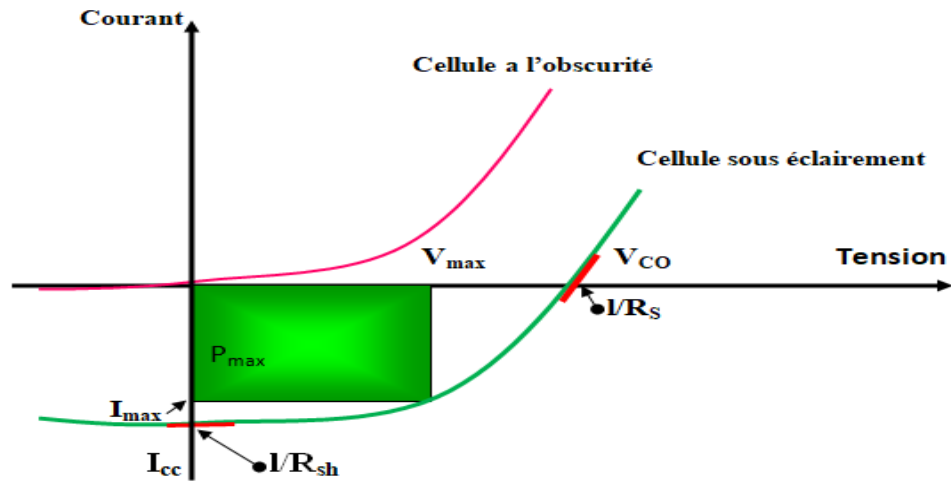
$I_s$  : le courant de saturation de la diode.

$q$  : la charge élémentaire.

$K$  : la constante de Boltzmann.

$T$  : la température

La caractéristique d'une cellule à l'obscurité est identique à celle d'une diode. Nous avons représenté sur la figure (1.7). Les deux caractéristiques courant-tension d'une cellule solaire à l'obscurité en rose, et sous illumination en vert.

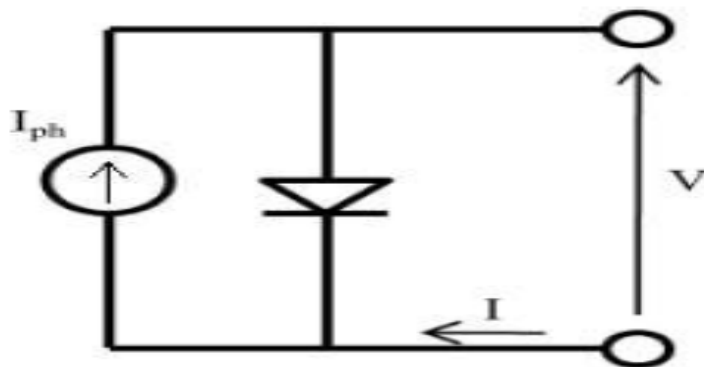


**Figure I.7:** caractéristique courant-tension d'une cellule

Lorsqu'une cellule PV est sous illumination, des paires électrons-trous se créent et forment ainsi le courant photogène  $I_{ph}$ . Sur le schéma équivalent, ce courant photogène est modélisé par l'ajout d'un générateur de courant en parallèle de la diode formée par la jonction p-n. Le schéma équivalent d'une cellule PV idéale est présenté à la figure (I.7).

La courbe courant-tension de la cellule photovoltaïque est donc la résultante du courant de polarisation dû au déséquilibre des mouvements des porteurs au sein de la cellule et du courant photovoltaïque dû à la création de porteurs sous éclairage. Cette courbe est décrite par l'équation suivante :

$$I(V) = I_0 \left( e^{\frac{qV}{kT} - 1} \right) - I_{ph}(V) \quad (I.2)$$



**Figure I.8 :** Schéma équivalent d'une cellule PV idéale.



#### **I.4.2.1. Courant de court-circuit $I_{CC}$ :**

Le courant de court-circuit est le courant débuté par la cellule sous éclairement en court-circuitant la sortie. C'est-à-dire que :  $I_{CC} = I (V = 0)$ . Pour une cellule solaire idéale le courant de court-circuit est égal au courant photovoltaïque  $I_{ph}$  [14].

$$I_{CC} = I_{ph} \quad (I.3)$$

#### **I.4.2.2 Tension à circuit ouvert $V_{CO}$ :**

La tension de circuit ouvert est la différence de potentiel mesurée aux bornes de la cellule lorsque la sortie est en circuit ouvert. C'est-à-dire :  $V_{CO} = V (I = 0)$ . La tension de circuit ouvert est exprimée selon l'équation suivante [15].

$$V_{CO} = \frac{KT}{q} \ln \left( \frac{I_{ph}}{I_s} + 1 \right) \quad (I.4)$$

avec :

K : Constant de Boltzmann ( $1,38 \cdot 10^{-23}$  J/K).

q : Charge de l'électron ( $1,6 \cdot 10^{-19}$  C).

#### **I.4.2.3 Réponse spectral $SR(\lambda)$ :**

La réponse spectrale d'une cellule solaire est le rapport du courant total généré par la cellule au courant qui peut être générée pour chaque longueur d'onde du spectre incident. Elle renseigne sur la réaction de la cellule à la radiation incidente et elle permet de fixer la gamme d'utilisation de la cellule [12].

$$SR = \frac{I_{ph}(\lambda)}{qF(\lambda)(1-R(\lambda))} \quad (I.5)$$

#### **I.4.2.4. Facteur de forme FF :**

Le facteur de forme FF (fill factor), caractérise la forme de la caractéristique  $I(V)$  de la cellule entre  $I_{CC}$  et  $V_{CO}$ . Il est égal au rapport de la surface du rectangle  $P_{max}$  (obtenu en modifiant la valeur de la résistance externe, quand l'aire du rectangle défini par les axes Ox, Oy et les droites  $x=I_m$  et  $y=V_m$  passe par un maximum) sur celle du rectangle dont les côtés mesurent  $V_{CO}$  et  $I_{CC}$ . Il est défini par la relation suivante [16]

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

où

- $P_{max}$  : représente la puissance maximale de la cellule solaire.
- $I_m$  : le courant maximum.
- $V_m$  : la tension maximale.

#### I.4.2.5. Le rendement :

##### a. Le rendement quantique externe EQE :

Le rendement quantique est défini par le rapport entre le nombre d'électrons dans le circuit externe et le nombre de photons incidents. Lorsque les photons perdus par réflexion (à la fenêtre de la cellule) et les photons transmis (absorption incomplète) ne sont pas pris en compte, (Internal Quantum Efficiency). Dans le cas contraire, ce paramètre s'appelle le rendement quantique externe, EQE (External Quantum Efficiency).

$$EQE = (1-R)e^{-\alpha x_{ij}} \quad (I.7)$$

avec :

R : La réflexion

$\alpha$ : Coefficient d'absorption

$x$  : La largeur de la zone de déplétion (charge d'espace)

##### b. Le rendement quantique interne IQE :

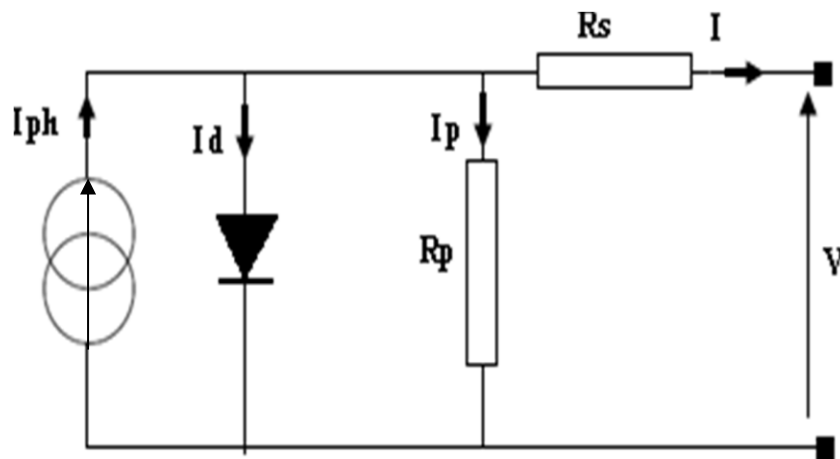
Le rendement quantique interne IQE de la cellule est le rapport du nombre de porteurs générés sur le nombre de photons pénétrant dans le matériau, il est relié au rendement quantique externe EQE par l'équation :

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

#### I.4.2.6. Résistance série ( $R_s$ ) et résistance de court-circuit ( $R_p$ ) :

Une cellule photovoltaïque n'est jamais parfaite. Pour bien traduire le comportement d'une cellule PV, deux résistances sont ajoutées sur le schéma équivalent (Figure I.9).

L'analogie entre le fonctionnement de la cellule photovoltaïque sous éclairage et celui d'un générateur de courant produisant un courant  $I_{ph}$  auquel se soustrait le courant de la polarisation de la diode en polarisation directe. Une ou plusieurs diodes supplémentaires, traduisant les différents mécanismes de recombinaison pouvant se produire dans la cellule (le facteur d'idéalité et la densité de courant de saturation diffère pour chaque diode). Un modèle à deux diodes est souvent utilisé pour les cellules solaires.



**Figure I.9:** Circuit équivalent d'une cellule photovoltaïque

Les différents paramètres de ce modèle sont :

- $I_{ph}$  : Le générateur de courant
- $R_s$  : résistance série
- $R_p$  : La résistance de fuite.
- La diode : modélise la diffusion des porteurs dans la base de l'émetteur.

L'équation de la courbe I-V prenant en compte ces deux résistances s'écrit sous la forme suivante :

$$I(V) = I_0 \left( e^{\frac{q(V - IR_s)}{nkT}} - 1 \right) - I_{ph} \frac{V - IR_s}{R_{sh}} \quad (I.7)$$

## **I.5.Génération de cellules solaires :**

Les cellules solaires sont classées en trois générations à suivant leur importance. Des recherches sont menées sur l'ensemble des trois générations en même temps pour améliorer leur efficacité, tandis que les cellules solaires de première génération constituent la plus grande part de la production commerciale de l'ordre de 89,7% en 2007.

### **I.5.1. Première génération :**

Les cellules de première génération sont basées sur une seule jonction P-N et utilisent généralement le silicium sous forme cristalline comme matériau semi-conducteur. Cette méthode de production est très énergivore et donc très chère. Elle nécessite par ailleurs un silicium de grande pureté. On différencie les cellules en silicium monocristallin et en silicium poly cristallin. Bien qu'il dispose d'une large partie d'absorption spectrale, les photons de haute énergie à la fin du bleu et Violet du spectre sont gaspillés sous forme de chaleur [17].

### **I.5.2. Deuxième génération**

Cette génération de cellule repose sur la déposition de matériaux semi-conducteurs en couches minces (thin film). Ces matériaux sont déposés par des procédés tels que PECVD (Plasma Enhanced chemical Vapour Deposition) sur un substrat. L'épaisseur de la couche varie entre quelques nanomètres à des dizaines de micromètres.

Ces techniques qui étaient initialement chères étaient réservées aux applications spatiales (en raison de leur poids par watt crête plus faible) et aux technologies de concentration. Avec l'augmentation des volumes de production, le prix de revient de ces techniques a baissé pour devenir compétitif avec les techniques cristallines de la première génération. Parmi les techniques en couches minces qui sont exploitées industriellement (Production de Mass), on distingue : CdTe : Cadmium Telluride (Telluride de cadmium), CIS / CIGS : Copper Indium Gallium Selenide, Silicium en couche mince : silicium amorphe  $\alpha$ -Si et microcristallin [18].

### **I.5.3. Troisième génération**

La recherche pour améliorer les performances des cellules solaires en améliorant son efficacité a conduit à l'élaboration de la troisième génération des cellules solaires [16].

La piètre performance électrique de la technologie en couche mince en maintenant de faibles coûts de production de cette technologie, les technologies de non semi-conducteurs (y compris les cellules à base de polymères).

Le progrès constant de l'évolution de l'industrie photovoltaïque est le résultat de l'augmentation de l'automatisation de la production de cellules solaires à couches minces avec une plus grande efficacité et des coûts réduits [19]

## **I.6. Avantages et inconvénients de l'énergie photovoltaïque :**

### **I.6.1. Avantages de l'énergie photovoltaïque :**

Nous pouvons citer quelques avantages de l'énergie photovoltaïque [20,21] :

- Une haute fiabilité ; les modules sont garantis pendant 25 ans par la plupart des Constructeurs
- Elle ne comporte pas de pièces mobiles, ce qui la rend particulièrement appropriée aux régions isolées. C'est la raison de son utilisation sur les engins spatiaux.
- ses coûts de fonctionnement sont très faibles vu les entretiens réduits, et ils ne nécessitent ni combustible, ni transport, ni personnel hautement spécialisé.
- La technologie photovoltaïque présente des qualités sur le plan écologique, car le produit final est non polluant, silencieux, peu de déchet.

### **I.6.2. Inconvénients de l'énergie photovoltaïque :**

Comme nous pouvons citer quelques inconvénients de l'énergie photovoltaïque [18, 19]:

- La source de carburant est diffusée (la lumière du soleil a une énergie relativement de faible densité).
- Le rendement réel de conversion d'un module est faible.
- Le coût initial d'installation est élevé.
- Le rendement horaire ou journalier imprédictible.
- Manque de stockage d'énergie économiquement efficace.

## **I.7. Les cellules organiques :**

L'effet photovoltaïque a été observé dans les matériaux organiques depuis plus de 40 ans, les premières cellules présentaient des très faibles rendements de l'ordre de  $10^{-5}$

%. En 1978, Merritt prévoyait que le rendement ( $\eta$ ) pourrait dépasser 1% [22], mais ce n'est qu'en 1986 avec les travaux de Tang que ce rendement a été atteint = 0.95% [23]. Cette valeur a parfois été reproduite avec des matériaux différents dans les années qui ont suivi, [24] mais elle n'a jamais été améliorée. Ce n'est que depuis le début du XXIème siècle que le rendement a recommencé à croître, atteignant 2,5 % avec les travaux publiés par Shaheen et al [21], 3,6 % avec ceux de Peumans et al [25] sous éclairage AM1,5 avec une puissance lumineuse de  $100 \text{ mW.cm}^{-2}$  et 4,2 % avec une double hétéro structure de fullerène (C60) et de phtalocyanine de cuivre (CuPc)[21] .



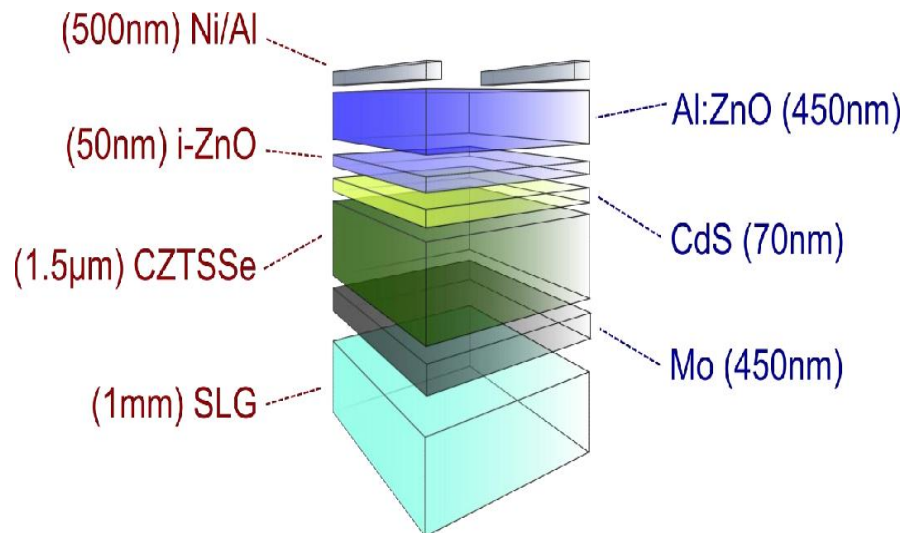
**Figure I.10 :** Cellule solaire tout organique sur substrat souple [25].

Les cellules photovoltaïques organiques ont connu le meilleur taux de croissance parmi les différentes filières photovoltaïque durant les 12 dernières années. Les dernières avancées dans le domaine : 13,2 % (taille  $1,1 \text{ cm}^2$ ) Heliatek [26] Heliatek est un des leaders dans la technologie mondiale de développement et de production de films organiques solaires à base de petites molécules, par dépôt sous vide dans un processus continu (roll-to-roll) à basse température. Son développement à grande échelle est aujourd'hui freiné par la faible mobilité des porteurs de charges dans le matériau, limitant le rendement, et la faible durée de vie des cellules. Sur ce dernier point, des améliorations sont attendues dans les procédés d'encapsulation contre la dégradation des cellules qui est principalement due aux réactions avec l'eau et l'oxygène lors d'une exposition à l'air. D'autres recherches portent aussi sur l'optimisation de l'absorbeur et l'utilisation d'architectures multi jonctions.

## **I.8. Généralité sur les couches mince :**

### **I.8.1. Définition d'une couche mince :**

On appelle 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 [27].



**Figure I.11** : Schéma représentant quelque couche mince [27].

### **I.8.2. La filière couches minces :**

D'autres filières sont en cours de développement dans le secteur photovoltaïque comme les cellules dites de seconde génération, composées de couches minces pour des raisons économiques (utilisation d'une plus faible quantité de matériau). Les matériaux photo-actifs les plus utilisés en couche minces sont le silicium amorphe (a-Si), le diséléniure de cuivre et d'indium (CIS) et le tellure de cadmium (CdTe)[28].

### **I.9. Différents types de filières technologiques des cellules photovoltaïques :**

Il existe différentes filières technologiques (figure I-12). On distingue la filière à base de silicium cristallin comprenant le mono et le multi cristallin, elle couvre de l'ordre de 88% de la production mondiale. La filière des couches minces comprenant les cellules au silicium amorphe, multi cristallin ou monocristallin ; au tellure de cadmium, au cuivre indium sélénium, et à l'arséniure de gallium. Il y a aussi la filière des cellules organiques.

Et, en ces dernières années, à partir de 2009, il y a eu naissance d'une nouvelle filière appelé filière pérovskite qui reste encore dans les laboratoires de recherche [29].

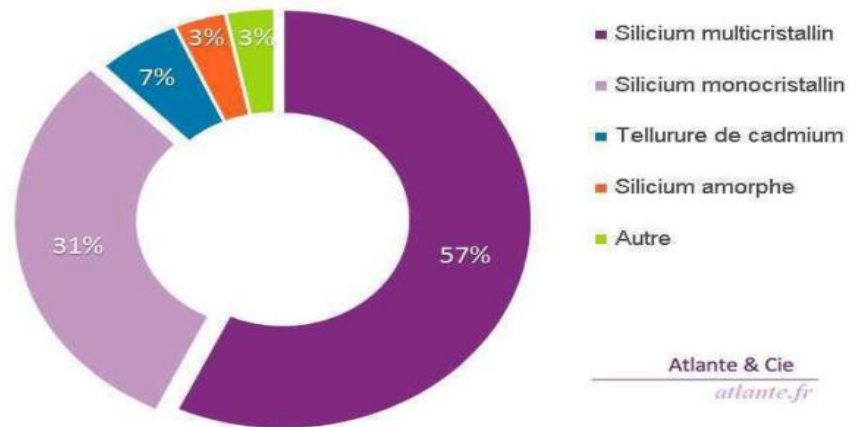


Figure I .12 : Parts de marché des différentes technologies solaires [29].

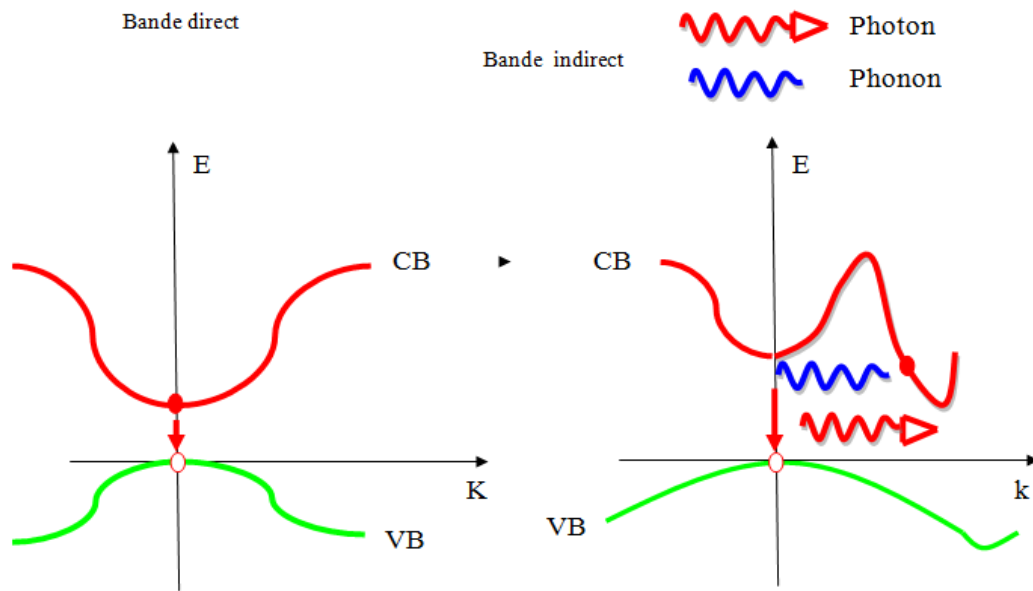
### I.10. Bandes interdites directes et indirectes :

Il y'a deux types de bandes interdites directes et indirectes, il est liée à la représentation de la dispersion énergétique d'un semi-conducteur.

**I.10.1. Les semi-conducteurs à gap direct :** On parle de semi-conducteur à gap direct lorsque le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction se situent à une même valeur du vecteur d'onde  $k$  [30]. (Voir figure I.13)

**I.10.2. Les semi-conducteurs à gap indirect :** Si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction ne correspondent pas au même vecteur d'onde  $k$  [30]. (Voir figure I.13)





**Figure I.13:** Schéma de semi-conducteur à gap direct et indirect [31].

### **I.11.Conclusion :**

Ce chapitre servira d'un point de départ afin de se familiariser avec le domaine photovoltaïque. Il nous a permis d'explorer le principe de la conversion photovoltaïque ainsi que les différentes techniques utilisées convertir pour le rayonnement solaire, Ainsi, nous avons rappelé quelques notions fondamentales à la compréhension de la photovoltaïque comme: le spectre solaire, l'effet photovoltaïque, le fonctionnement des cellules photovoltaïques et leurs caractéristiques principales et définir les paramètres qui influent sur leurs caractéristiques avec une modélisation de cette dernière par un circuit électrique .Puis, nous avons cité les avantages et les inconvénients de l'énergie photovoltaïque. Enfin, nous avons présenté quelque généralité sur les couches mince et différents types de filières technologiques des cellules photovoltaïques.

# **Chapitre II :**

## **Caractéristiques de matériaux CZTSSe**

## II.1 Introduction :

Après avoir présenté un aperçu des cellules solaires, de leur fonctionnement et de la façon dont elles convertissent l'énergie photovoltaïque en électricité, nous examinerons les structures que nous avons choisies pour étudier leurs propriétés électroniques (paramètre de maille, la contrainte et l'épaisseur critique), et optiques (énergies de gap, l'absorption, réfraction, réflexion et la transmission) et déterminer les meilleures valeurs à utiliser dans les simulations pour obtenir les meilleurs résultats.

## II.2. Présentation du logiciel de simulation SCAPS :

SCAPS est un logiciel de simulation des cellules solaires unidimensionnelles développé par le département des systèmes électronique et informatique (ELIS) de l'Université de Gent, Belgique.

SCAPS est développé à l'origine pour des structures des cellules de CuInSe<sub>2</sub> 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).

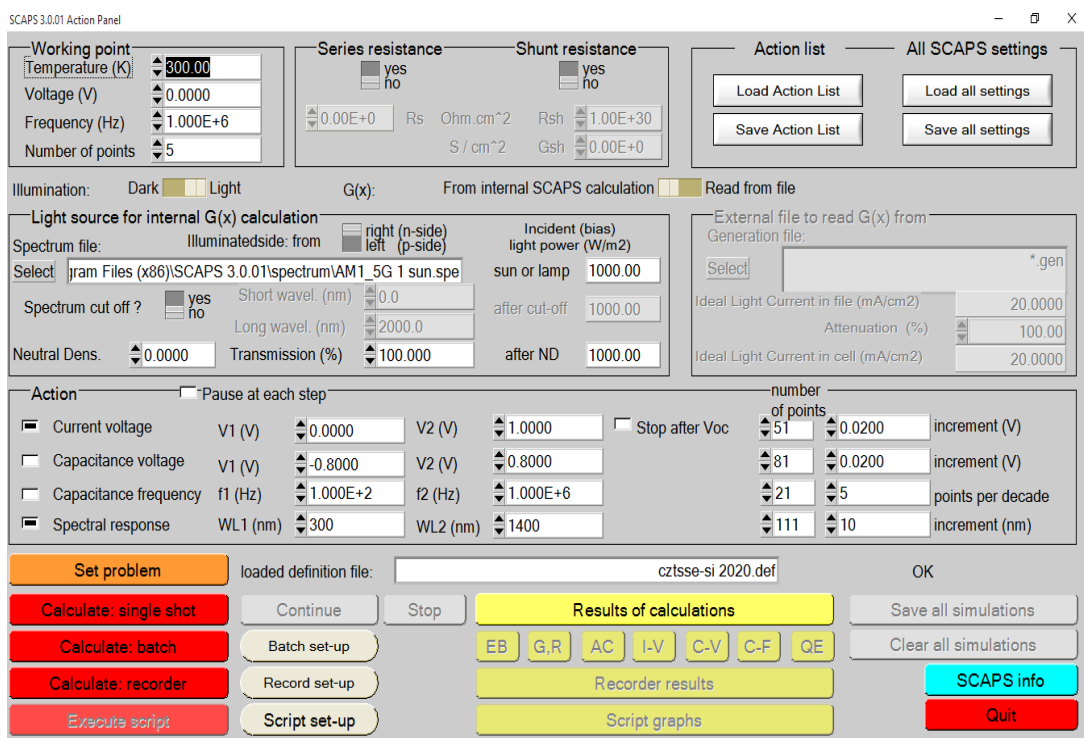


Figure II.1: Panneau de démarrage de SCAPS, le panneau d'action ou principal.

### II.2.1. Principe de la simulation numérique :

L'étude de la plupart des dispositifs à semi-conducteurs est basée sur la résolution simultanée de l'équation de Poisson et de l'équation de continuité. Il calcule à chaque instant et en tout point de l'espace en une suite d'éléments finis, la concentration des électrons et des trous et la valeur du potentiel électrostatique. L'équation de Poisson définit la relation entre le potentiel et la densité des porteurs :

$$\Delta V = \frac{-q}{\epsilon} (N_d - N_a + p - n) \quad (\text{II.1})$$

Où :

$\epsilon$  est la constante diélectrique,  $V$  le potentiel,  $q$  est la charge élémentaire d'électrons,  $N_d$  et  $N_a$  sont les concentrations des dopants donneurs et accepteurs ionisées,  $n$  et  $p$  sont les densités des porteurs.

L'évolution temporelle des densités de porteurs obéit aux équations de continuité (II.2) et (II.3) pour respectivement les électrons et les trous.

$$\frac{dn}{dt} = G - U_n + \frac{1}{e} \text{div} \vec{J}_n \quad (\text{II.2})$$

$$\frac{dp}{dt} = G - U_p + \frac{1}{e} \text{div} \vec{J}_p \quad (\text{II.3})$$

où :  $G$  et  $U$  sont respectivement les taux de génération et de recombinaison des porteurs, et sont respectivement les densités de courant des électrons et des trous. Les dérivations basées sur la théorie de transport de Boltzmann ont prouvé que la densité des courants dans les équations de Continuité peut être définie par le modèle d'entraînement-diffusion. Les densités de courants sont exprimées en deux termes. Le premier correspond à l'entraînement des charges par le champ électrique et le second correspond à la diffusion des porteurs.

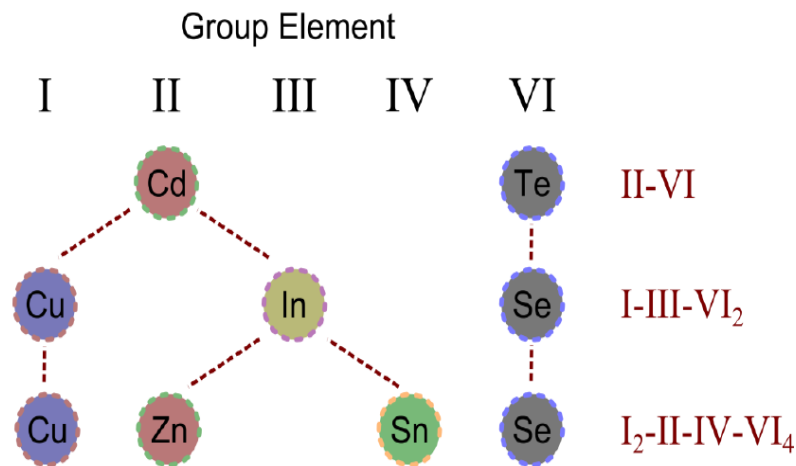
$$\vec{J}_n = qnD_n\vec{E} + qD_n\overrightarrow{\text{grad}n} \quad (\text{II.4})$$

$$\vec{J}_p = qpD_p\vec{E} + qD_p\overrightarrow{\text{grad}p} \quad (\text{II.5})$$

où :  $D_n$  et  $D_p$  sont les coefficients de diffusion.

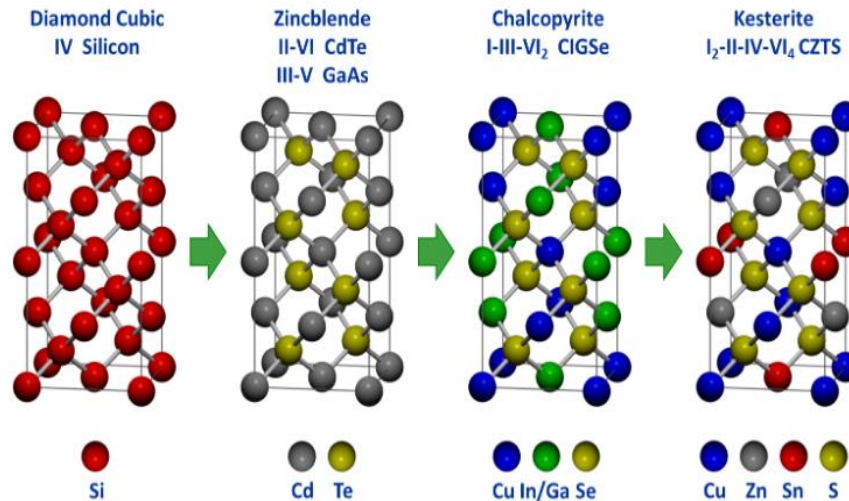
### II.3 Structure cristalline de CZTSSe

L'étude de la composition du CZTSSe réside dans le fait de représenter les compositions indépendamment les uns des autres des éléments cationiques, le cuivre, l'étain et le zinc et des éléments anioniques, le soufre et le sélénium. Le mécanisme de formation et les propriétés physiques des composés CZTSSe. La formation de composés  $I_2 - II - IV - VI_4$  comme le CZTSSe peut être obtenue à partir d'un semi-conducteur  $II - VI$  par remplacement séquentiel de cations dans lequel la règle de l'octet est respectée et la charge totale reste neutre (Figure II.2) [32].



**Figure II.2** : Les familles de semi-conducteurs dans le CZTSSe est issu [33].

Le CZTSSe peut cristalliser dans une structure dérivée de zincblende similaire à d'autres matériaux semi-conducteurs tels que le silicium et le CIGSe. Conceptuellement, cette cellule CZTSSe de kesterite est formée en remplaçant la moitié des sites In / Ga dans CIGSe par Zn et l'autre moitié par Sn. Cependant, CZTSSe peut avoir deux autres formes. La structure de la stannite a la même coordination tétraédrique, mais une symétrie différente en raison du placement alterné des anions dans le réseau cristallin. La structure dérivée de wurtzite est un tableau hexagonal compact ; Tous les trois ont la stœchiométrie nominale  $Cu_2ZnSnS_4$ , bien que la structure de la kesterite soit le plus stable souvent utilisé dans les cellules solaires [34].



**Figure II.3 :** Structures cristallines du  $\text{Cu}_2\text{ZnSn}$  (S, Se) [35]

## II .4 Les avantages et les inconvénients de CZTSSe :

### II .4.1 Les avantages :

Des éléments constitutifs de CIGS sont chers (In en Ga) et d'autres toxiques. En revanche, CZTSSe est un matériau semi-conducteur à base d'éléments abondants et donc à faible coût et non toxiques [36].

### II .4.2 Les inconvénients :

L'inconvénient majeur des cellules CZTSSe est leur rendement qui est faible et pose actuellement un problème.

## II.5 Structures de cellule solaire :

Toutes ces cellules solaires à couches minces sont basées sur la formation de la jonction p-n qui est formée entre la couche fenêtre de type n et couche absorbante de type p. La conception de la cellule solaire  $\text{ZnO} / \text{CdS} / (\text{CZTSe} / \text{CZTSSe} / \text{CZTS}) / \text{Mo}$  est illustré [37]. Ce qui suit sont les composants et les caractéristiques de chaque couche.

### II.5.1 Couche absorbante CZTSSe :

Le photon ayant une énergie égale ou supérieure à la bande interdite de la couche absorbante est uniquement absorbé. Les matériaux de type p avec une valeur optimale de la bande interdite et un coefficient d'absorption élevé est souhaité comme couche

absorbante. CZTSe / CZTSSe / CZTS ont des valeurs du coefficient d'absorption égales  $10^4 \text{ cm}^{-1}$  et aussi bande interdite dans la gamme de [1-1.5] eV [38]. De plus, l'épaisseur de la couche joue un rôle significatif dans l'amélioration de l'efficacité.

### **II.5.2 Couche de fenêtre :**

Couche d'oxyde conducteur transparent (TCO) L'oxyde de zinc (ZnO) est utilisé comme couche de fenêtre. Le ZnO est un matériau semi-conducteur avec une bande interdite plus élevée (3,3 eV). Il n'absorbe pas la plupart des spectres visibles qui sont qualité essentielle pour la couche de fenêtre [37].

### **II.5.3 Le contact avant :**

Une couche d'oxyde de zinc (ZnO) intrinsèque de 50 nm d'épaisseur puis de ZnO dopée avec de l'aluminium de 400 nm d'épaisseur sont déposées sur la couche tampon en CdS. C'est un oxyde transparent conducteur (TCO, Transparent Conductive Oxide). Il sert à réaliser l'électrode en face avant de la cellule photovoltaïque [33].

### **II.5.4 Contact arrière :**

Le molybdène est utilisé comme métal de contact arrière parce qu'il a une réflectivité optique supérieure qui aide au piégeage de la lumière pour renvoyer les photons dans l'absorbeur couche. Il montre également une bonne conductivité électrique car la fonction de travail du Mo est de 5 eV [37].

### **II.5.5 Couche tampon :**

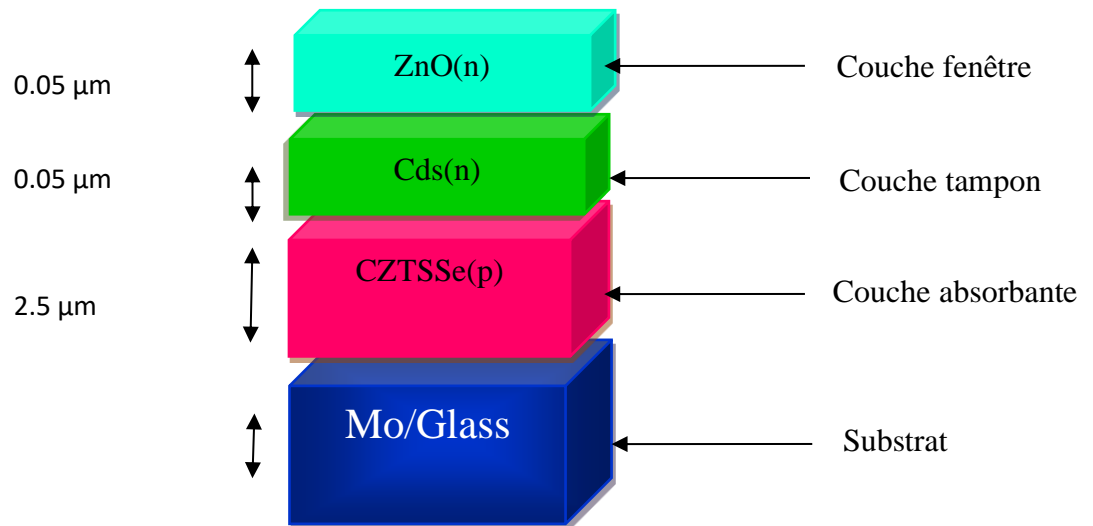
La fonction principale de la couche tampon est de fournir l'alignement de bande entre la couche absorbante et couche de fenêtre. Dans cette étude, Le de cadmium (CdS) est utilisé comme couche tampon qui a une bande interdite de 2,40 eV, ce signifie que les photon dans la gamme ultraviolette (24% des spectres solaires) ne sont pas absorbés à la place transmise à la couche absorbante.

## **II.6. Structure et paramètres des cellules étudiées :**

### **II.6.1. Structure des cellules étudiée :**

Afin de compléter notre étude, nous avons conçu le modèle suivant pour simuler les paramètres électriques et optiques de cette cellule solaire afin d'obtenir une efficacité électrique optimale. Dans notre étude, nous utilisons une cellule solaire composée des

hétérojonctions suivantes : ZnO /CdS /CZTSSe / Mo. Comme le montre la figure ci-dessous (II.5).

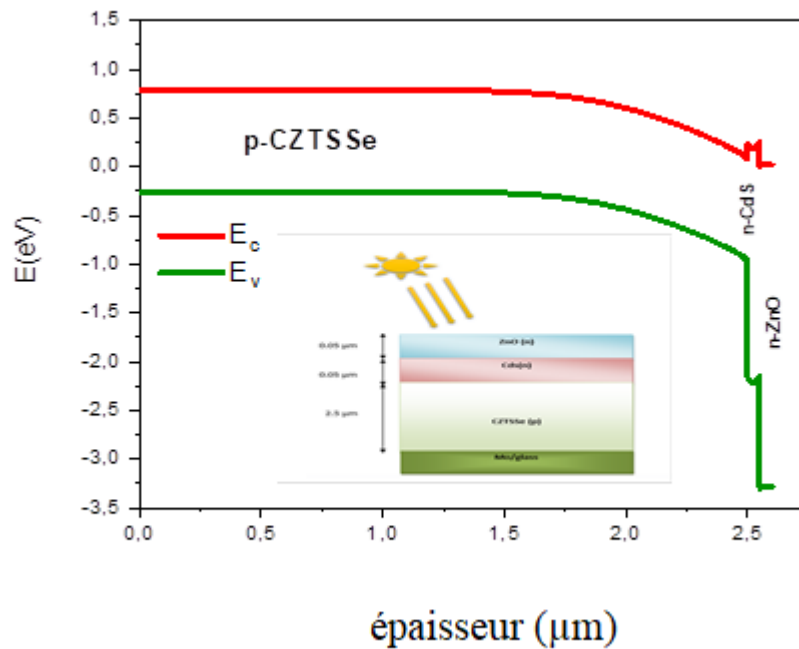


**Figure II.4 :** Structure étudiée de la cellule solaire simulée par logiciel SCAPS de CdS/CZTS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub> [39].

### II.6.2 Structure de bande de CZTSSe :

L'alignement de bande est l'un des éléments physiques les plus fondamentaux propriétés qui influencent le transport des porteurs photogénie. La différence d'énergie de la bande de conduction peut être modifiée en modifiant le rapport  $x$ , ce qui prend un décalage de bande négative ou positive valeurs dépendant de la bande interdite de la couche absorbante. La figure II.5 représente le diagramme de bande d'énergie complète sous la lumière de notre cellule étudiée basé sur couche absorbante CZTSSe obtenue à partir du logiciel de simulation SCAPS-1D [40].



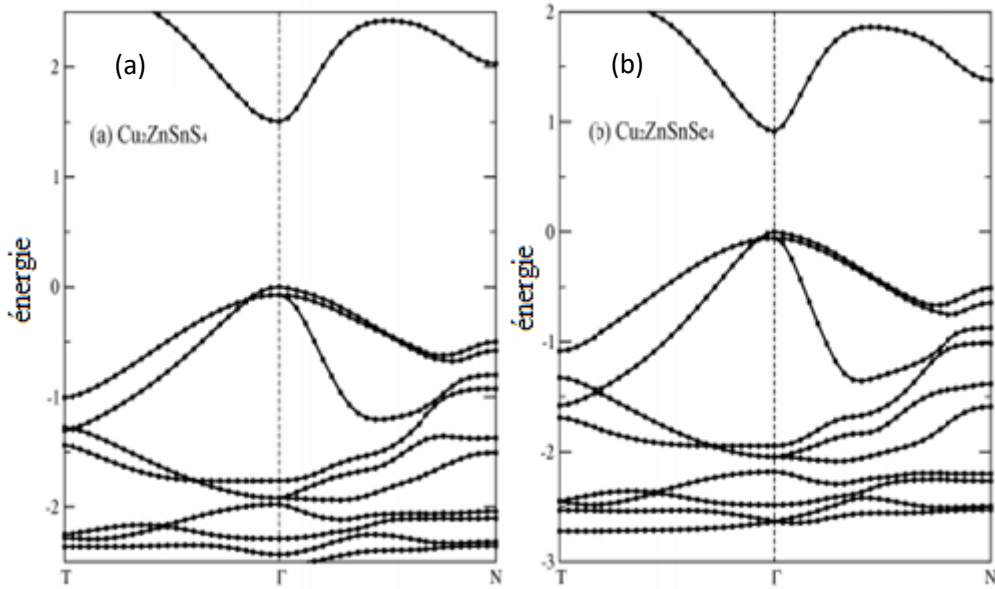


**Figure II.5 :** Diagramme de bande d'énergie.

Les couches semi-conductrices étaient CZTSSe comme absorbant, CdS à la fois comme tampon, et le ZnO c'est une fenêtre, le sujet de notre étude était dans les modèles numériques pour voir l'effet de celui-ci et aussi ses propres paramètres sur la performance électrique de la cellule solaire. Dans notre étude on utilise deux structures pour faire la simulation, la première ne contient pas de silicium et dans la deuxième on ajoute une couche de silicium.

### **II.6.3. Structure électronique :**

Comme dérivés du CdTe binaire et du CuInSe<sub>2</sub> ternaire, CZTS et CZTSe ont tous deux des bandes interdites directes au point  $\Gamma$ , comme la montre (la figure II.6), où nous traçons la structure de bande calculée en utilisant le fonctionnel hybride de corrélation d'échange. Bien que les tailles de bande interdite soient différentes, la forme globale de la structure de bande de CZTS et CZTSe est très similaire, ce qui est facile à comprendre car ils ont une liaison (hybridation d'états atomiques) et une structure cristalline similaires [38].



**Figure II.6 :** a) Structure de bande électronique de CZTS  
 b) Structure de bande électronique de CZTSe [38].

## II.7 Les paramètres électroniques et optiques :

**Tableau II.1 :** paramètre de structure ZnO/CdS/CZTSSe/Si.

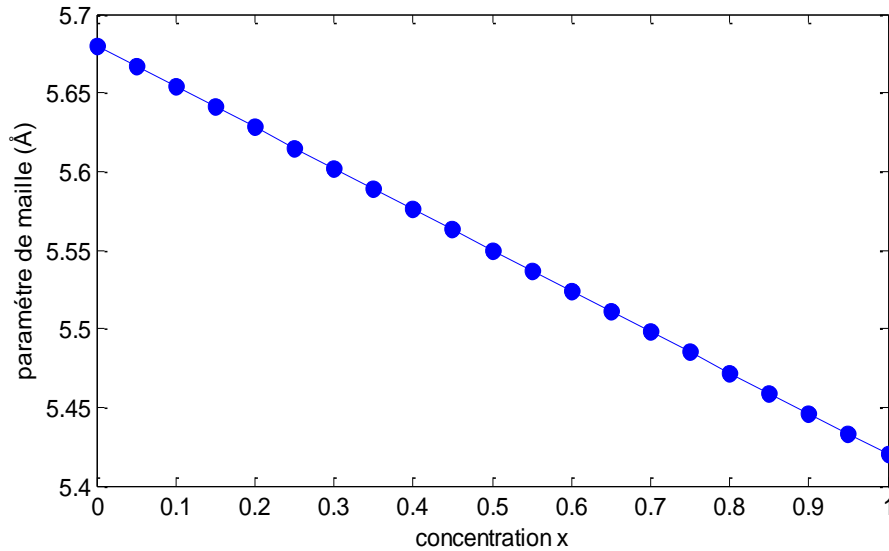
Propriétés de matériau, T=300K	a(Å)	E <sub>g</sub> (eV)	C <sub>11</sub> (GPa) [60]	C <sub>12</sub> (GPa) [60]
CdS (Zinc-Blende)	5.82[42]	2.4		
CZTS (kësterites)	5.43[41]	1.5	114.42	74.51
CZTSe (kësterites)	5.68[41]	1	95.95	62.80
Si (diamant)	5.431[43]	1.12		

### II.7.1. Les paramètres électroniques :

#### II.7.1.1. Paramètre de maille :

On a trouvé ce résultat par l'utilisation de l'expression suivante :

$$a_{CZTSSe} = x \cdot a_{CZTS} + (1 - x) \cdot a_{CZTSe} \quad (\text{II.6})$$



**Figure II.7 :** variation du paramètre de maille en fonction de la concentration de sulfure de CZTSSe.

La figure II.7 représente la variation du paramètre de maille en fonction de la concentration du sulfure de CZTSSe. Dans cette figure, Nous avons observé une nette diminution de la valeur du paramètre de maille après avoir augmenté la concentration de sulfure. Par exemple pour  $x=0.1$  on a le paramètre de maille  $a=5.65 \text{ \AA}$  si on augmente la concentration à  $0.5$ , on aura une valeur de  $a=5.55 \text{ \AA}$  on trouvé  $\Delta a=-0.1 \text{ \AA}$ . Nous pouvons voir que la concentration du sulfure a un effet direct sur le paramètre de maille.

### II.7.1.2. La couche contrainte :

L'épitaxie désigne une technique, utilisant deux cristaux, visant à gagner quelques nanomètres d'épaisseur. L'épitaxie de matériaux désaccordés est devenue bien maîtrisée, grâce notamment aux progrès accomplis au niveau des techniques de croissance. Ainsi, l'accord de maille n'est plus un impératif, mieux encore les effets des contraintes sont exploités dans plusieurs composants électroniques et optoélectroniques performants. En effet, l'utilisation d'hétéro structures à contrainte permet d'ajuster la longueur d'onde d'émission, en modifiant les positions en énergie des bandes de valence et de conduction.

Le substrat de paramètre de maille  $a_s$  différent de celui de la couche épitaxie  $a_e$ , impose sa maille à cette dernière, cette différence de maille provoque une déformation de

la couche épitaxie, soit en tension ou en compression par des déformations bi-axiales ( $\epsilon_{xx}$  et  $\epsilon_{yy}$ ) et uniaxiale ( $\epsilon_{zz}$ ) [44].

Les déformations sont données par [44] :

➤ Uni axiale dans la direction de croissance :

$$\epsilon_{zz} = -\frac{C_{12}}{C_{11}} (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}) = -2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \epsilon_{xx} \quad (\text{II.7})$$

➤ Bi axiale dans le plan de croissance :

$$\epsilon_{xx} = \frac{a_s - a_e}{a_e} \quad (\text{II.8})$$

Les étapes d'obtention de ces résultats sont décrites ci-dessous [45-46] :

$$a_s = a_{CZTSSe} = x \cdot a_{CZTS} + (1 - x) \cdot a_{CZTSe} \quad (\text{II.9})$$

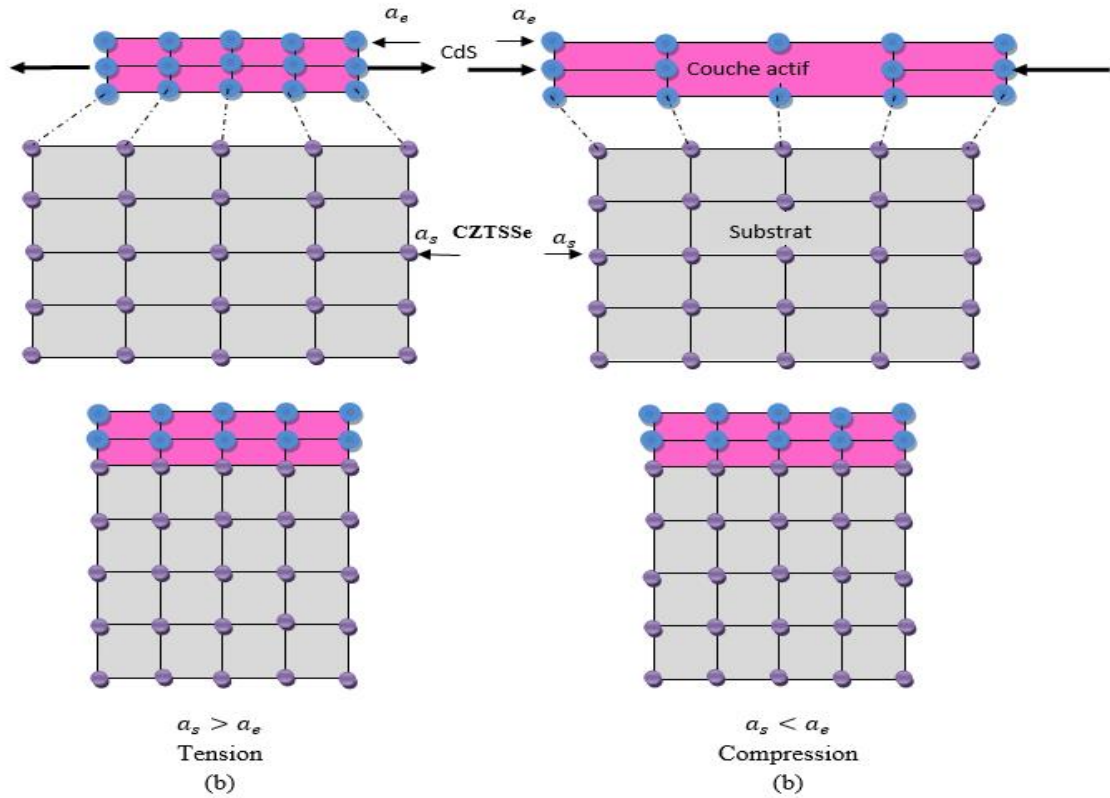
avec :

$\epsilon$  : La déformation ou le désaccord de maille.

$a_e$  : paramètre de maille épitaxie de couche CdS

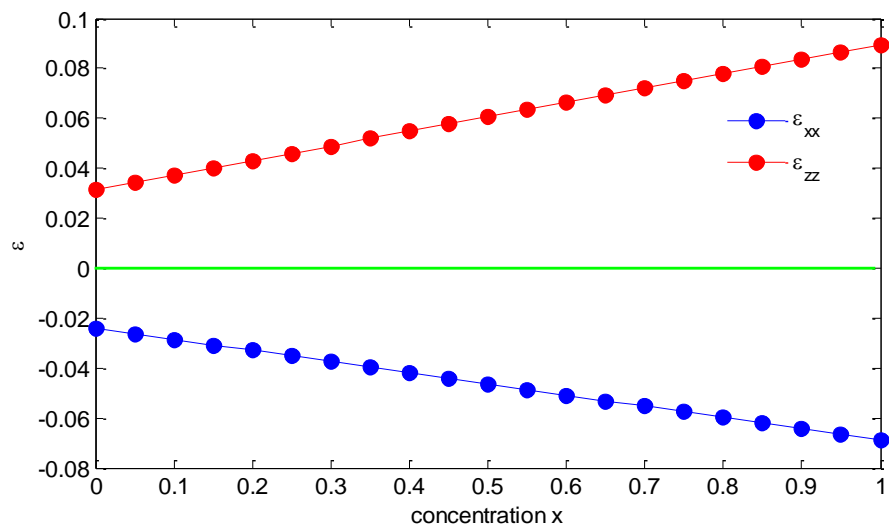
$a_s$  : paramètre de maille de substrat (CZTSSe).

$C_{ij}$  : Les coefficients d'élasticité.



**Figure II.8 :** Illustration des deux types de déformation  
a) Couche en tension. b) couche en compression [47].

**a. L'effet de contrainte :**



**Figure II.9 :** variation de déformation bi axiale  $\epsilon_{xx}$  et uni axiale  $\epsilon_{zz}$  de CZTSSe en fonction de la concentration de sulfure.

La figure II.9 représente la variation des déformations bi axiale  $\epsilon_{xx}$  et uni axiale  $\epsilon_{zz}$  en fonction de la concentration du sulfure de cellule CZTSSe. Nous avons remarqué que la contrainte bi axiale  $\epsilon_{xx}$  diminue avec l'augmentation de la concentration du sulfure, par contre la contrainte unie axiale  $\epsilon_{zz}$  augmente. Alors on constate que le matériau CZTSSe est soumis à une contrainte compressive.

### II.7.1.3. Epaisseur critique de structure CdS/CZTSSe :

L'épaisseur critique dépend des propriétés mécaniques des matériaux (coefficients élastiques  $C_{11}$  et  $C_{12}$ ), ainsi que du degré de désaccord paramétrique  $\Delta$  entre le substrat et la couche épitaxie. Si l'épaisseur de la couche épitaxie dépasse la valeur de l'épaisseur critique, les mailles ne subissent plus les contraintes mécaniques imposées par le substrat et le paramètre de maille atteint celui du matériau massif. Le réseau est totalement relaxé [48].

$$h_c = \frac{a_e}{\beta \times \sqrt{2} \times \pi \times \Delta} \times \frac{1-0.25 \times \gamma}{1+\gamma} \times \text{Ln} \left( \frac{h_c \sqrt{2}}{a_e} + 1 \right) \quad (\text{II.10})$$

avec :

$$\Delta : \text{le désaccord paramétrique qui est donné par : } \Delta = \left| \frac{a_s - a_e}{a_s} \right| \quad (\text{II.11})$$

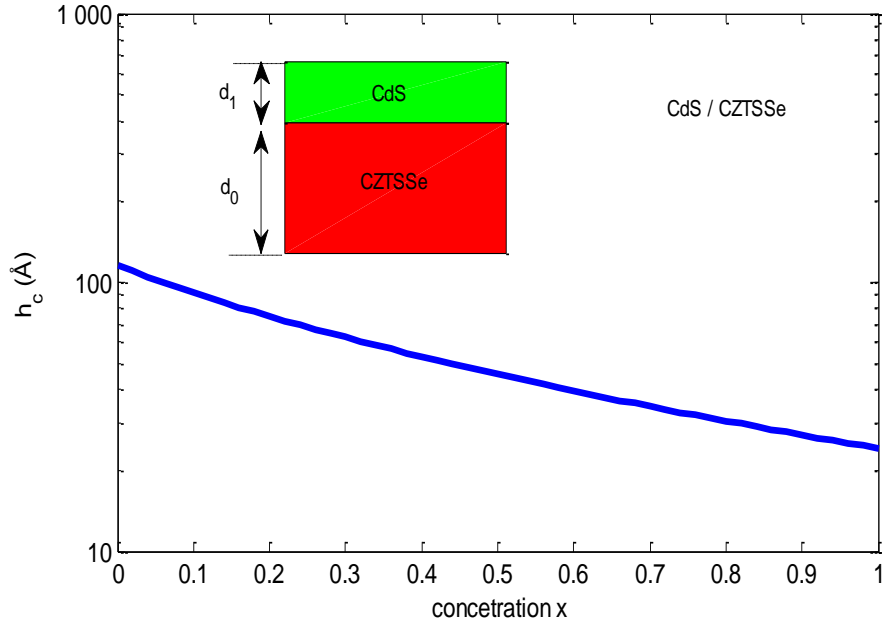
$$\gamma : \text{Le coefficient de poisson qui est donné par : } \gamma = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{21}} \quad (\text{II.12})$$

Où,  $C_{11}$  et  $C_{12}$  sont les constantes d'élasticité obtenues par l'interpolation linéaire des binaires.

$a_e$  : Paramètre de maille de la couche relaxée.

$\beta$ : est un coefficient qui prend les valeurs suivantes selon le type de la structure.

$$C_{ij} = C_{ij} (\text{CZTS}) \cdot x + C_{ij} (\text{CZTSe}) \cdot (1-x) \quad (\text{II.13})$$



**Figure II.10** : l'épaisseur critique en fonction de la concentration de sulfure.

La figure II.10 représente la variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration de sulfure. On remarque que la concentration de sulfure a pour effet de diminuer l'épaisseur critique.

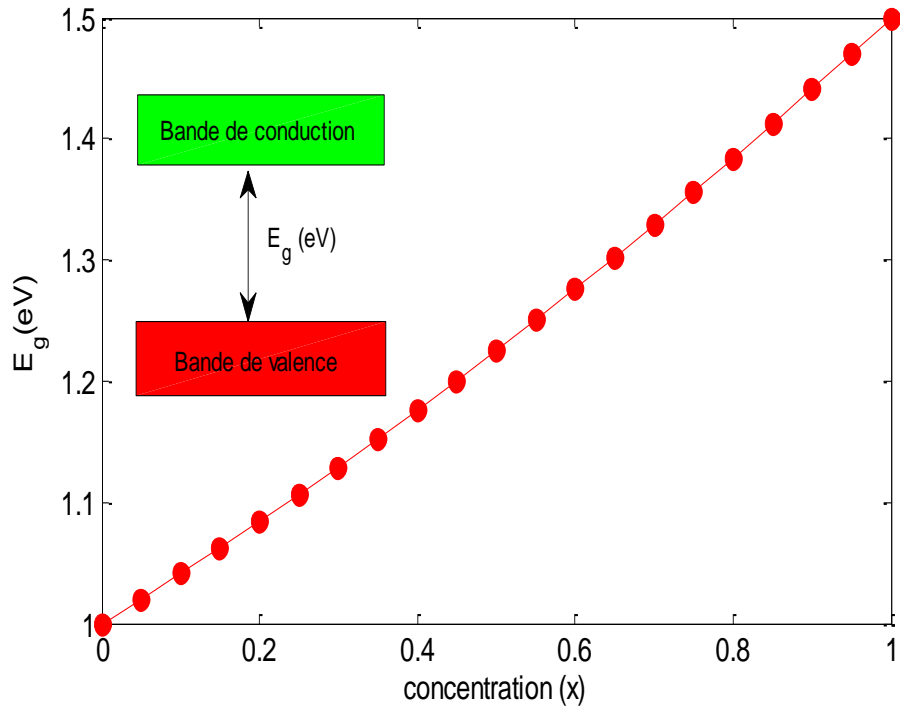
## II.7.2. Les propriétés optiques :

### II.7.2.1. Energie de gap :

L'énergie de bande interdite vaut 1,0 eV pour le CZTSe pur tandis que celle du CZTS pur est de 1,5 eV [49]. Elle varie entre ces deux valeurs pour le CZTSSe et peut-être modulée grâce au taux de soufre et de sélénium dans le matériau [50]. Les valeurs des largeurs de bande interdite qui peuvent être atteintes sont proches de la valeur optimale qui permet une absorption du spectre solaire en atteignant la limite de Shockley-Queisser à 32% de rendement pour un absorbeur dont la largeur de bande interdite vaudrait 1,13 eV [51]. Ces résultats trouvés par l'expression suivante [52].

$$E(x) = x \cdot E_g(\text{CZTS}) + (1 - x) \cdot E_g(\text{CZTSe}) - b \cdot x \cdot (1 - x) \quad (\text{II.14})$$

Avec  $b$  est un paramètre de bowing égal à 0,1 pour le matériau CZTSSe [51].



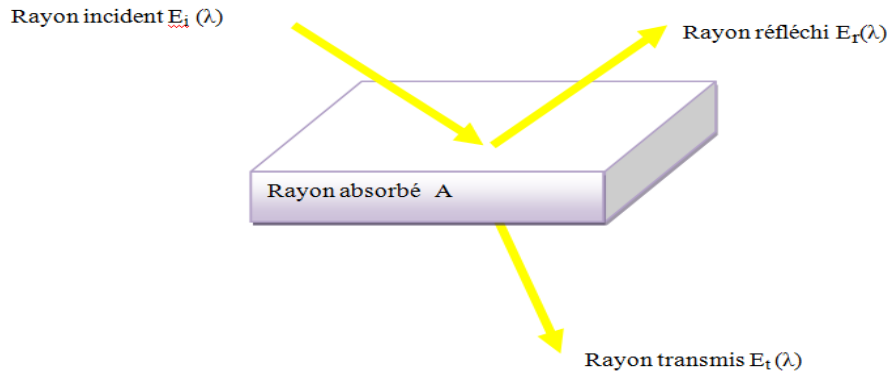
**Figure II.11 : variation** de l'énergie de gap du CZTSSe en fonction de concentration du sulfure.

La figure II.11 représente la variation de l'énergie de gap  $E_g$  de CZTSSe en fonction de la concentration de sulfure. On remarque que l'énergie de gap augmente avec l'augmentation de la concentration du sulfure. Par exemple pour  $x=0.3$  on a  $E_g= 1.13$  eV et pour  $x= 0.6$  la valeur de l'énergie de gap égale 1.28 eV alors on a une augmentation de  $\Delta E_g= 0.15$  eV. Nous pouvons voir que la concentration de sulfure a pour effet d'augmenter l'énergie de gap.

### II.7.2.2. Les interactions rayonnement :

La lumière est une onde électromagnétique traversant le vide à la vitesse constante,  $c$ , de  $3.10^8$  m/sec. Et dont la fréquence  $\nu$  et les longueurs d'onde  $\lambda$  est liée par  $c=\lambda\nu$ . L'interaction entre la lumière et la matière est divisée en trois effets principaux (figure II.12) :





**Figure II.12** : les interactions rayonnement [53]

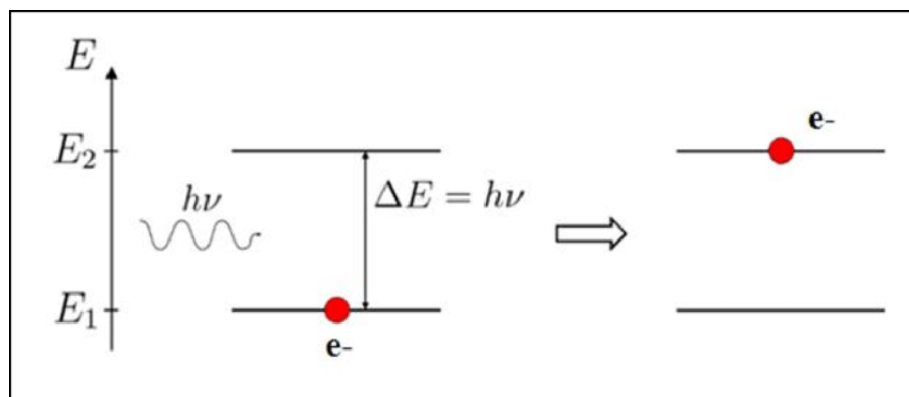
$$E_I(\lambda) = E_R(\lambda) + E_A(\lambda) + E_T(\lambda) \quad (\text{II.15})$$

avec :

- $E_I$  : Energie incidente.
- $E_r$  : Energie Réfléchie.
- $E_A$  : E nergie Absorbée.
- $E_t$  : Energie Transmise.

### II.7.2.2.1 L'absorption :

Quand un électron dans un état occupé de la bande de valence capture l'énergie de photon incident, il se déplace à un état vide de la bande de conduction et produise un trou, ce phénomène s'appeler l'absorption. L'énergie du photon est supérieure au  $\Delta E$  de la bande interdite :  $h\nu > E_g$ .



**Figure II.13** : le phénomène d'absorption [54].

**a. Coefficient d'absorption :**

Le CZTSSe possède un coefficient d'absorption supérieur à  $10^4 \text{ cm}^{-1}$  [20] au maximum d'émission du spectre solaire à des longueurs d'onde inférieures à la bande interdite. Cela lui permet d'absorber au moins 90% de la lumière du spectre solaire sur une épaisseur relativement faible de l'ordre du micromètre. Le coefficient d'absorption  $\alpha$  peut être exprimé sous deux formes [55] :

$$\alpha(x, E) = \alpha_0 \frac{\sqrt{E - E_g(x)}}{E} \quad (\text{II.16})$$

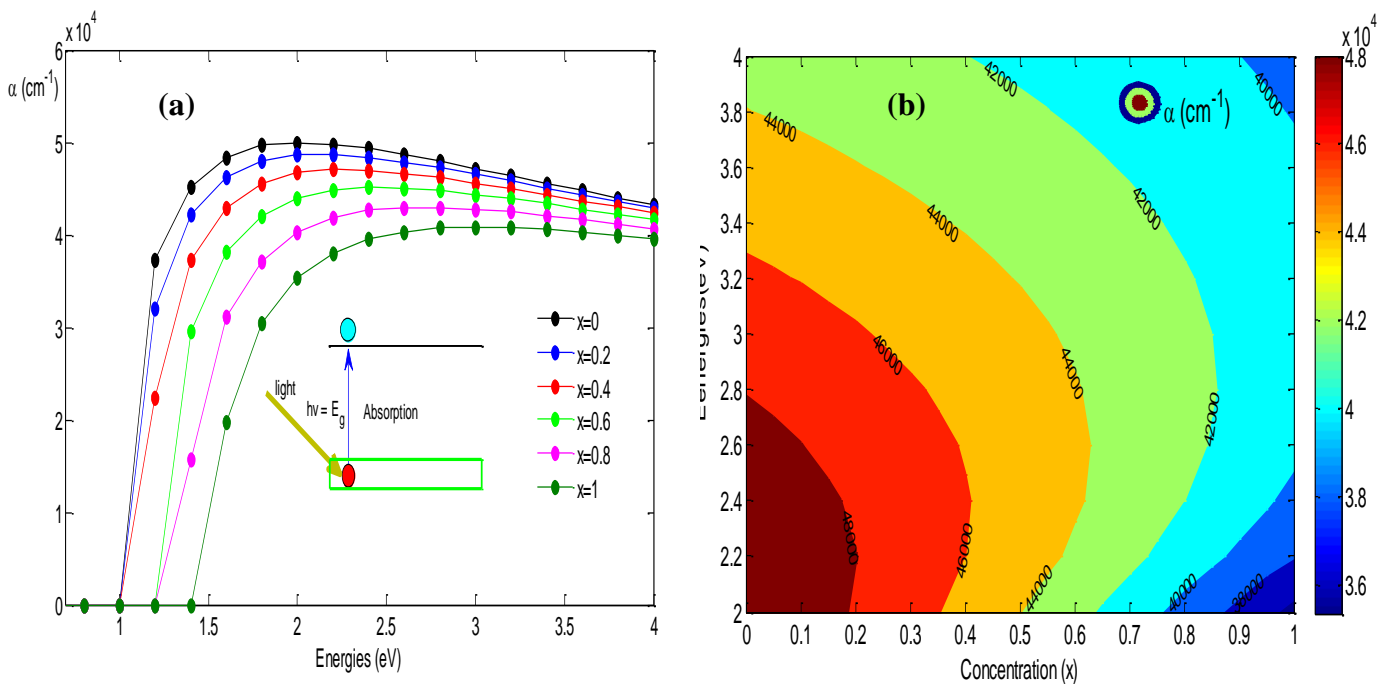
avec  $\alpha_0 = 10^5 \text{ cm}^{-1}$

Est-on à 2<sup>ème</sup> expression que définit le coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde [55] :

$$\alpha(\lambda) = \frac{\alpha \lambda}{4\pi} \quad (\text{II.17})$$

$\alpha$  : coefficient d'absorption

$\lambda$  : longueur d'onde



**Figure II.14 :** a) variations de coefficient d'absorption  $\alpha$  en fonction d'énergie de photon pour plusieurs concentration, b) variations du coefficient d'absorption  $\alpha$  en fonction de l'énergie de photon et de concentration de sulfure.

La figure II.14 a) représente la variation du coefficient d'absorption  $\alpha$  en fonction d'énergie de photon pour plusieurs concentrations. On remarque que le coefficient d'absorption est nul dans l'intervalle [0-1.5] eV pour plusieurs concentrations dans le cas  $h\nu \leq E_g$ , après on remarque une augmentation du coefficient d'absorption dans l'intervalle [1.5,2] eV, par exemple pour  $E_{\text{photon}} = 2.5\text{eV}$ , on trouve  $\alpha = 4.5 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1}$  pour le cas  $h\nu > E_g$ . La figure (II.16) b) représente les variations de coefficient d'absorption  $\alpha$  en fonction d'énergie de photon et la concentration. On remarque que le coefficient d'absorption diminue lorsque la concentration du sulfure augmente. Par exemple à  $E_{\text{photon}} = 2.8\text{eV}$ , pour  $x = 0.1$  le coefficient d'absorption égal  $4 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$ , et pour  $x = 0.7$   $\alpha = 4.2 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$ . On a une diminution de  $\Delta\alpha = 2 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$ . D'après la figure II.14 b) on constate que l'énergie de photon et la concentration du sulfure influent sur coefficient d'absorption.

#### II.7.2.2.2. Réfraction :

La réfraction est la déviation de la lumière lorsqu'elle traverse l'interface entre deux milieux transparents d'indices optiques différents.

Dans le cas de notre matériau CZTSSe l'indice de réfraction ( $n$ ) peut être déterminé à partir de la réflectance ( $R$ ) en utilisant la relation [56] :

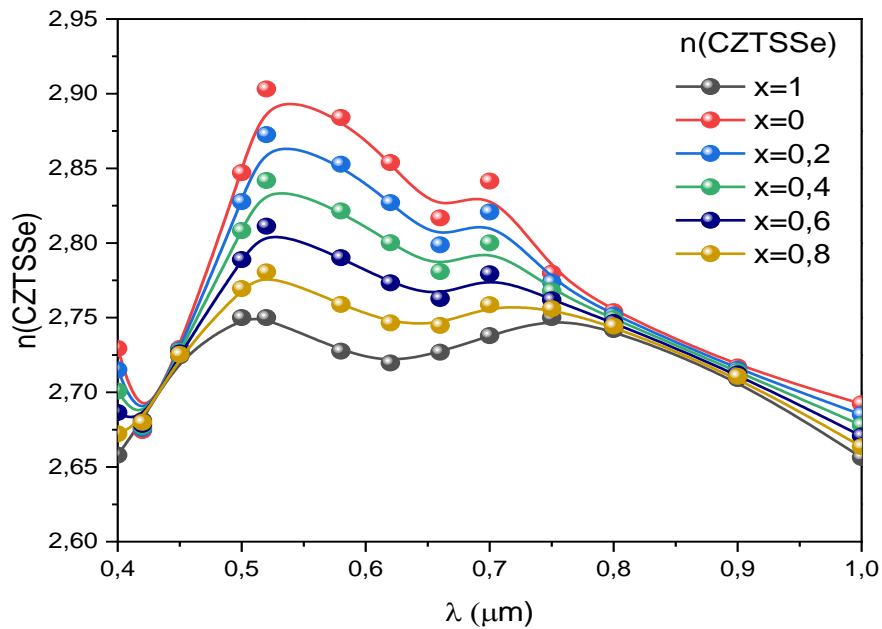
$$n = \left[ \frac{(1+R)^2}{(1-R)^2} - (k_0^2 - 1) \right]^{1/2} + \frac{(1+R)}{(1-R)} \quad (\text{II.18})$$

avec le coefficient d'extinction ( $k_0$ ) déterminée par la relation [57-58] :

$$k_0 = \frac{\alpha\lambda}{4\pi} \quad (\text{II.19})$$

De l'équation au-dessus nous avons trouvé les résultats montrés dans la figure (II.13) :

$$n_{(\text{CZTSSe})} = x \cdot n_{(\text{CZTS})} + (1 - x) \cdot n_{(\text{CZTSe})} \quad (\text{II.20})$$



**Figure II.15 :** Variation de l'indice de réfraction en fonction de la longueur d'onde pour plusieurs valeurs de concentration de sulfure.

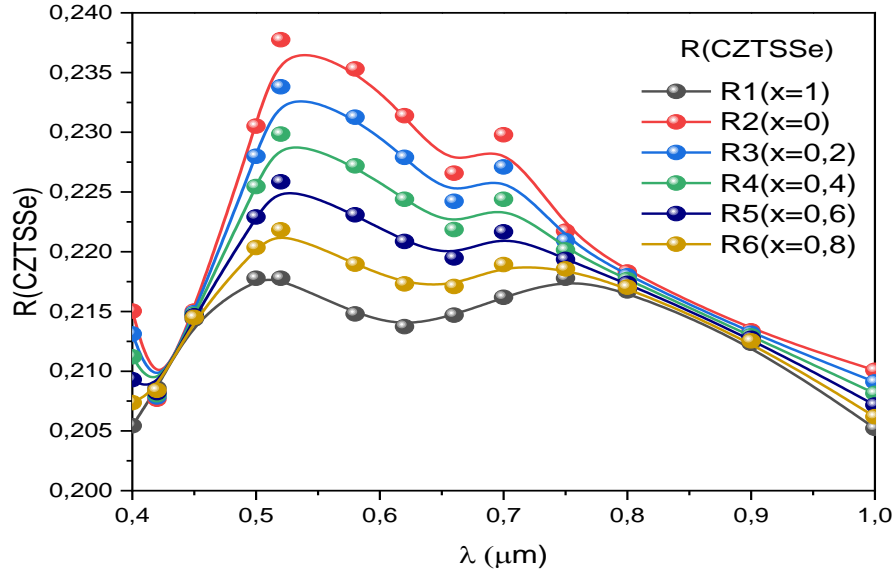
La figure II.15 représente la variation de l'indice de réfraction  $n$  en fonction de la longueur d'onde pour plusieurs valeurs de la concentration  $x$ . On remarque une diminution de l'indice de réfraction dans l'intervalle  $[0.4 ; 0.45] \mu\text{m}$  de la longueur d'onde et une augmentation dans l'intervalle  $[0.45, 0.66] \mu\text{m}$  pour plusieurs valeurs de concentration de sulfure. On observe ensuite une diminution de l'indice de réfraction sur l'intervalle  $[0.66 ; 1] \mu\text{m}$  de longueur d'onde pour plusieurs valeurs de concentrations de sulfure. Par exemple pour  $\lambda$  varie de  $0.5 \mu\text{m}$  à  $0.8 \mu\text{m}$  on a  $n_1=2.85$  et  $n_2=2.76$  pour une concentration de sulfure  $x=0$ , alors on a une diminution  $\Delta n=0.09$ . Et pour une longueur d'onde égale à  $0.9 \mu\text{m}$ , l'indice de réfraction diminue de  $2.73$  à  $2.70$  pour différentes concentrations du sulfure  $x$ . D'après loi de Vegard si  $x=0$  l'indice de réfraction est égal  $n(\text{CZTSe})$  et pour  $x=1$  l'indice de réfraction est égal  $n(\text{CZTS})$ .

### II.7.2.2.3. Réflexion :

Lorsqu'un rayon arrive à l'interface entre deux milieux différents, les faisceaux qui ne sont pas absorbés ou cassés donnent naissance à un rayon réfléchi. Par conséquent, on note le coefficient de réflexion,  $R$ , aux interfaces est défini comme le carré du module [59] :

$$R = \left( \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \right)^2 = \left( \frac{(n_1 - n_2)^2 + (k_1 - k_2)^2}{(n_1 + n_2)^2 + (k_1 + k_2)^2} \right)^2 \quad (\text{II.21})$$

Avec  $n_1$ (indice réfraction de l'air) pour  $x = 0$  ; on a le coefficient de réflexion de  $R(\text{CZTSSe})$  égal  $R(\text{CZTSe})$  ; et pour  $x=1$  on a le coefficient de réflexion de l'alliage  $R(\text{CZTSSe})$  égal  $R(\text{CZTS})$ , d'après la loi de Vegard :



**Figure II.16:** Variation de coefficient de réflexion en fonction de la longueur d'onde pour des différentes valeurs de concentration sulfure.

La figure II.16 représente la variation du coefficient de réflexion  $R$  en fonction de la longueur d'onde pour différentes valeurs de la concentration de sulfure. On remarque qu'il y a une diminution de l'indice de réflexion dans l'intervalle  $[0.4 ; 0.45] \mu\text{m}$  de la longueur d'onde pour plusieurs valeurs de concentration de sulfure et en ensuite une augmentation dans l'intervalle  $[0.4 ; 0.58] \mu\text{m}$  de longueur d'onde ; et une diminution de l'indice de réflexion sur l'intervalle  $[0.58 ; 1] \mu\text{m}$ . Par exemple lorsque  $\lambda$  varie de  $0.5 \mu\text{m}$  à  $0.8 \mu\text{m}$  on a  $n_1=0.220$  et  $n_2=0.218$  pour une concentration de sulfure  $x = 0.8$ , alors on a une diminution  $\Delta n=0,002$ . D'après loi de Vegard si  $x=0$  l'indice de réfraction est égal  $n(\text{CZTSe})$  et pour  $x=1$  l'indice de réfraction est égal  $n(\text{CZTS})$ .

#### II.7.2.2.4. Transmission :

Une expression pour le facteur de transmission totale  $T_0$  dans une couche plane non absorbante qui tient compte des effets de multiples réflexions internes au sein de cette couche est donnée par [60] :

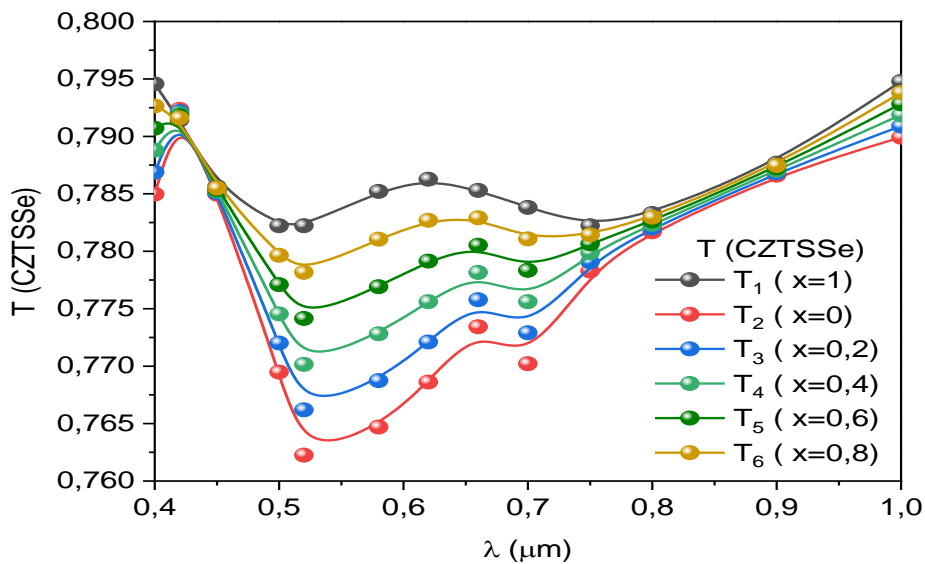
$$T = \frac{I}{I_0} \text{(II.22)}$$

$$T_0 = \frac{1-R}{1+R} \text{(II.23)}$$

Le facteur de transmission utilisé pour notre matériau est [61] :

$$T = 1 - R \text{ (II.24)}$$

Avec l'absorption  $\alpha=0$



**Figure II.17 :** variation de la transmission en fonction de la longueur d'onde pour différentes concentrations de sulfure.

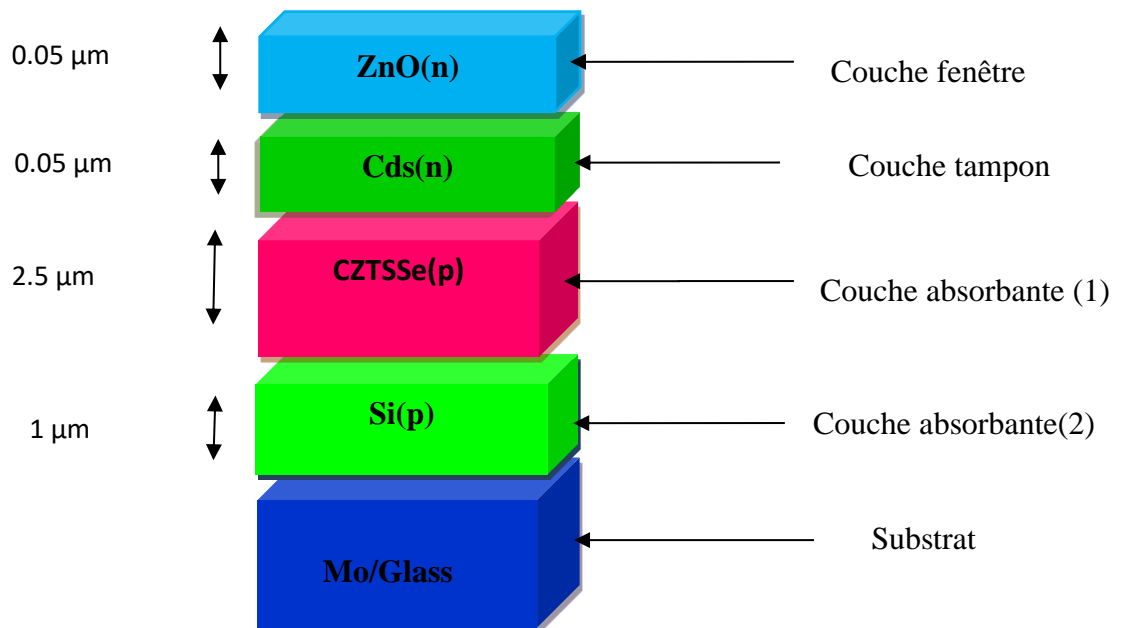
La figure II.17 représente la variation de facteur de transmission  $T$  en fonction de la longueur d'onde pour différentes valeurs de la concentration de sulfure. On remarque une diminution de transmission dans l'intervalle de  $[0,4 ; 0,5] \mu\text{m}$  de la longueur d'onde pour plusieurs valeurs de concentration de sulfure ; ensuite on a une augmentation dans l'intervalle  $[0,5 ; 1] \mu\text{m}$ .

## II.8. La deuxième Couche absorbante de silicium :

Le silicium (Si) est une couche mince. Il correspond à un gap indirect égal  $E_g=1.12$  eV puisque le minimum de la bande de conduction est repéré en un point autre que le maximum de la bande de valence dans la zone de Brillouin [62].

### II.8.1. Structure cellules étudiée avec la couche de silicium :

Dans notre étude, nous utilisons une cellule solaire composée des hétérojonctions suivantes : ZnO /CdS /CZTSSe /Si/Mo/glass. Comme la montre dans l'image ci-dessous (figure II.18).



**Figure II.18 :** Structure étudiée de la cellule solaire simulée par logiciel SCAPS de CdS/CZTS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub>/Si [63].

### II.8.2. Diagramme de bande de Si :

La figure II.19 représente le diagramme de bande d'énergie complète sous la lumière de notre cellule étudiée basé sur une couche absorbante Si obtenue à partir du logiciel de simulation SCAPS-1D.

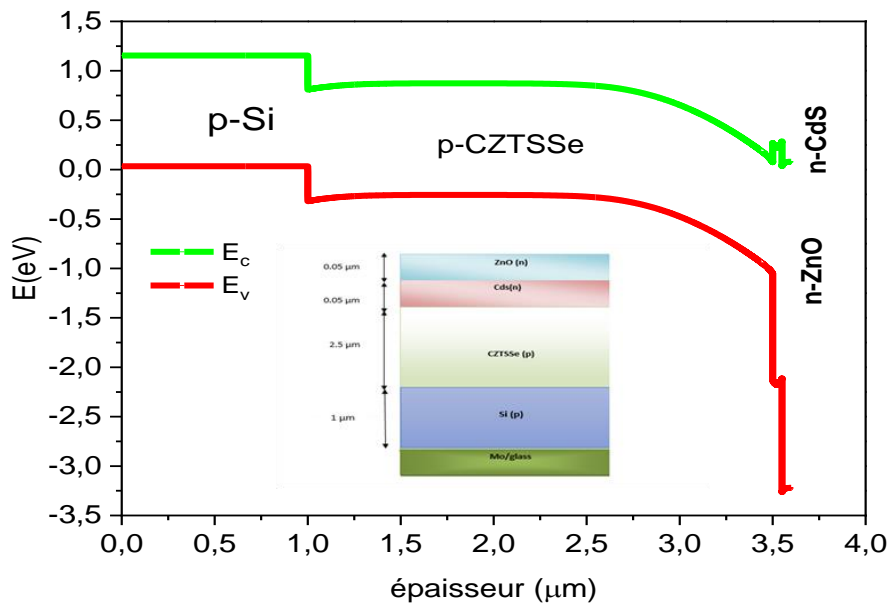


Figure II.19 : Digramme de bande de Si.

### II.8.3. Propriété électronique de structure Cds/CZTSSe/Si :

#### II.8.3.1. Contrainte de la structure Cds/CZTSSe/Si :

D'après l'utilisation de l'équation (II.9) on a trouvé les résultats dans la figure II.20

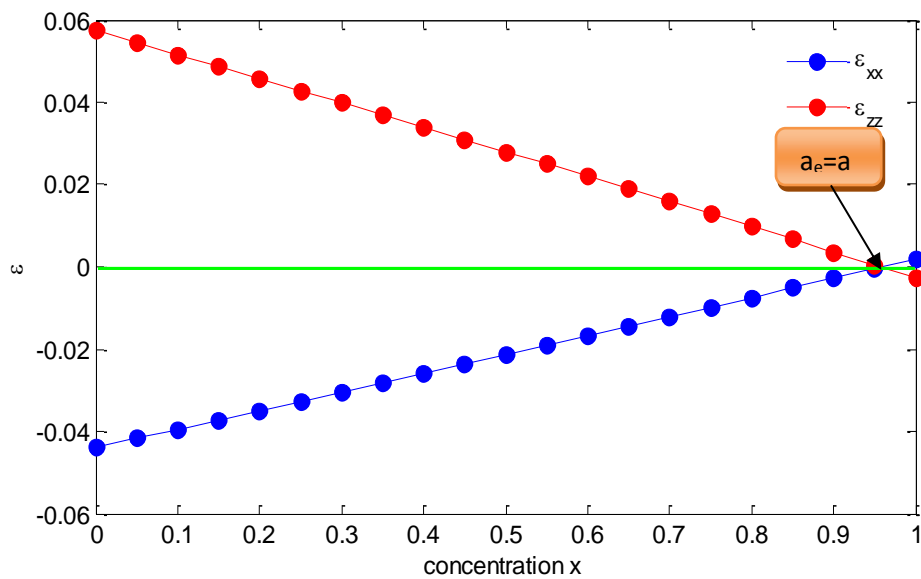
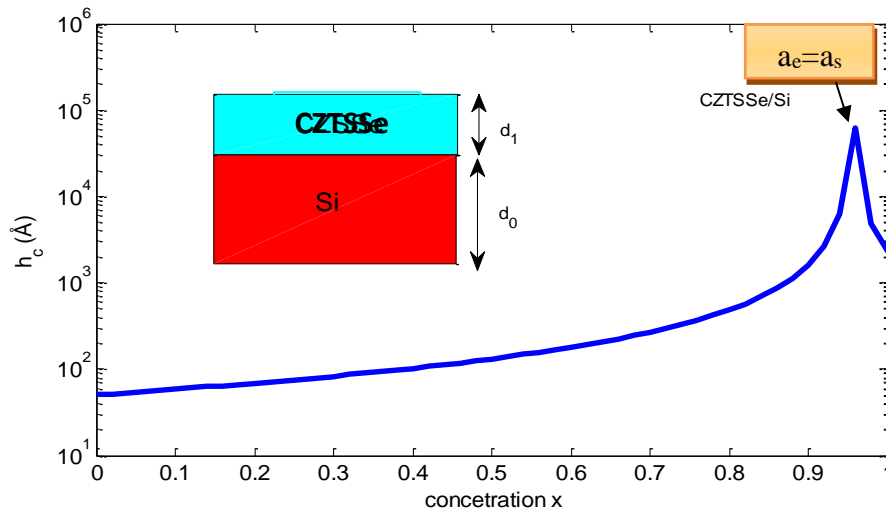


Figure II.20: variation des déformations bi axiale  $\epsilon_{xx}$  et uni axiale  $\epsilon_{zz}$  de Si en fonction de la concentration de sulfure.



La figure II.20 représente la variation des déformations bi axiale  $\epsilon_{xx}$  et uni axiale  $\epsilon_{zz}$  en fonction de la concentration de sulfure. Nous pouvons observer que la déformation bi axiale  $\epsilon_{xx}$  augmente avec l'augmentation de la concentration du sulfure, par contre la déformation unie axiale  $\epsilon_{zz}$  diminue. Alors on constate que le matériau Si (2<sup>ème</sup> couche absorbante) est soumis à une contrainte compressive.

### II.8.3.2. Epaisseur critique de structure CZTSSe/Si :



**Figure II.21 :** variation l'épaisseur critique en fonction de la concentration de sulfure de structure Si.

La figure II.21 représente la variation de l'épaisseur critique en fonction de la concentration de sulfure de la structure CZTSSe/Si. On a observé une augmentation de l'épaisseur critique dans l'intervalle  $[0 ; 0.95]$  de concentration de sulfure et diminution de 0.95 à 1. Accord de maille : Pour  $x=0.95$ , la couche épitaxie est en accord de maille avec le substrat  $a_e=a_s$ .

## II.9. Conclusion :

D'après notre étude sur les caractéristiques de CZTSSe et Si, Nous avons constaté qu'ils ont d'excellentes propriétés optoélectroniques pour certaines valeurs de la concentration de sulfure de la couche absorbante ajoutée aux cellules solaires, ils ont une petite énergie de gap et une absorption élevée, cela nous permet de compter sur elle pour étudier les cellules solaires qui seront simulés dans le chapitre suivant et illustré dans ce chapitre.

# **Chapitre III :**

## **Résultats et**

### **discussion**

### III.1. Introduction :

Après avoir présenté les généralités indispensables à l'étude des cellules photovoltaïques à couches minces, nous allons maintenant déterminer les caractéristiques de ces cellules à base d'un type de structure choisi.

Dans notre étude nous avons simulé ces paramètres physiques et électriques par le logiciel unidimensionnel appelé SCAPS-1D. Pour cela nous avons choisi un modèle de structure selon la littérature et nous avons essayé de calculer nos résultats simulés sur des exemples expérimentaux. Par la suite nous avons défini la structure qui nous donne un rendement électrique optimal.

### III.2 Paramètres utilisés dans la simulation :

**Tableau III.1:** propriétés des contacts avant et arrière [40].

	Contact avant	Contact arrière
Propriété de contacte	Bande plate	Bande plate
Vitesse de recombinaison thermoïnique/ surface (cm/s) électron	$10^7$	$10^7$
Vitesse de recombinaison thermoïnique/ surface(cm/s) Trou	$10^7$	$10^7$
Réflexion (%)	10	20

### III.2.1 Paramètres de matériau utilisé dans cette simulation :

**Tableau III.2:** Paramètres des matériaux utilisés dans cette simulation [40].

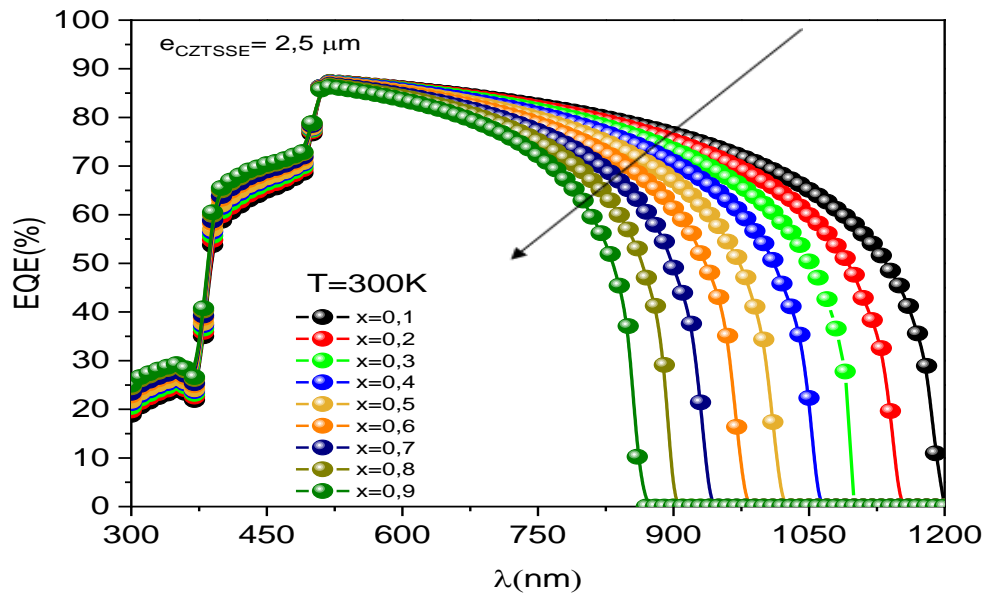
Propriétés matérielles	p-Si	p-CZTSSe	n-Cds	i-ZnO
Épaisseur ( $\mu\text{m}$ )	1	2.5	0.05	0.05
Energie gap (eV)	1.12	1-1.5	2.4	3.30
Affinité électronique $\chi$ , (eV)	4.05	4.365-4.48	4.40	4.20
Permittivité diélectrique $\epsilon$ , (relative)	11.19	13.24-10.32	10	9
BC densité d'état ( $\text{cm}^{-3}$ )	$2.8 \times 10^{19}$	$2.10^{18}$	$2.2.10^{18}$	$2.210^{18}$
BV densité d'état ( $\text{cm}^{-3}$ )	$2.65.10^{19}$	$1.8.10^{19}$	$1.10^{19}$	$1.8.10^{19}$
Vitesse thermique des électrons (cm/s)	$1.10^7$	$1.10^7$	$1.10^7$	$1.10^7$
Vitesse thermique des trous (cm/s)	$1.10^7$	$1.10^7$	$1.10^7$	$1.10^7$
Mobilité d'électron ( $\text{cm}^2/\text{Vs}$ )	1450	$1.10^2$	$1.10^2$	$1.10^2$
Mobilité des trous ( $\text{cm}^2/\text{Vs}$ )	500	$2.5.10^1$	$2.5.10^1$	$2.5.10^1$
$N_d$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	0	0	$1.10^{17}$	$1.10^{17}$
$N_a$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$10^{20}$	$10^{15}$	$1.10^{18}$	$1.10^{18}$
Coefficient d'Absorption	Valeur scapas	$2 \cdot 10^4$	Valeur SCAPS	Valeur SCAPS
Type de défaut	(a)	(d)	(a)	(a)

### III.3 Effet de la concentration de sulfure sur les caractéristiques électriques de la structure CdS/CZTS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub> :

**Tableau III.3:** Résultats finaux de l'effet de la concentration de sulfure sur la structure CdS/ CZTS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub> sous éclaircissement.

X	Eg(eV)	$\chi$ (eV)	$\epsilon$ (relative)	Vco (Volt)	Jcc(mA/cm <sup>2</sup> )	FF (%)	$\eta$ (%)
0,1	1,041	4,36	13,24	0,4789	33,92	75,35	12,24
0,2	1,084	4,38	12,88	0,5211	32,82	76,25	13,04
0,3	1,129	4,39	12,56	0,5647	31,53	77,10	13,73
0,4	1,176	4,41	12,16	0,6103	30,02	77,85	14,27
0,5	1,225	4,42	11,58	0,6583	28,45	78,50	14,70
0,6	1,276	4,44	11,44	0,7074	26,82	79,16	15,02
0,7	1,329	4,45	11,08	0,7596	25,59	79,56	15,47
0,8	1,384	4,47	10,72	0,8126	24,06	80,08	15,66
0,9	1,441	4,48	10,324	0,8676	22,27	80,54	15,57

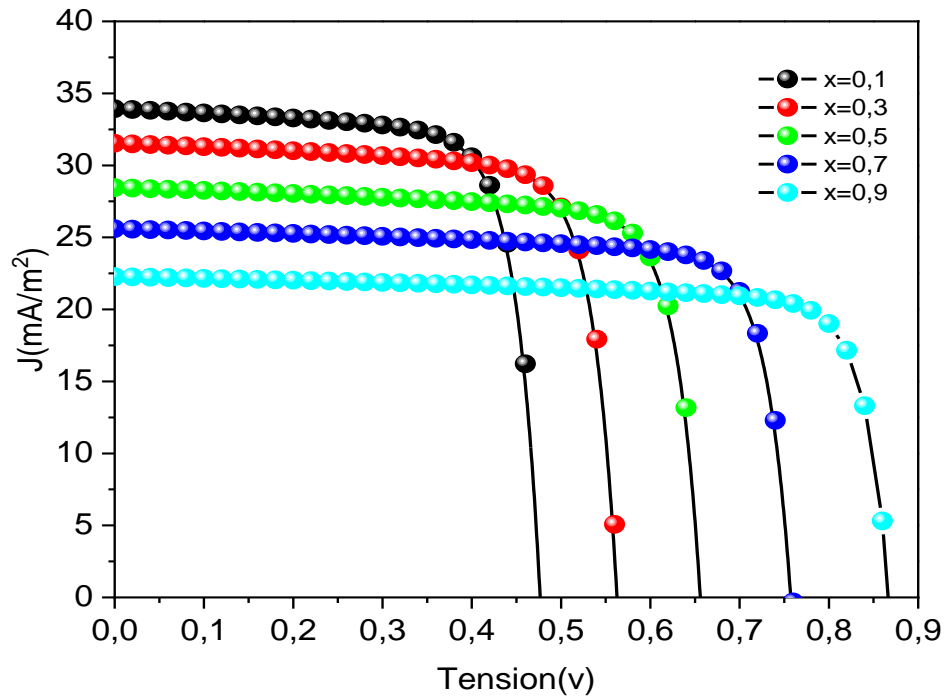
### III.3.1. Effet de la concentration de sulfure sur le rendement quantique externe de structure CdS /CZTS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub>:



**Figure III.1 :** variation du rendement quantique externe EQE en fonction de la longueur d'onde pour différentes valeurs de concentration de sulfure.

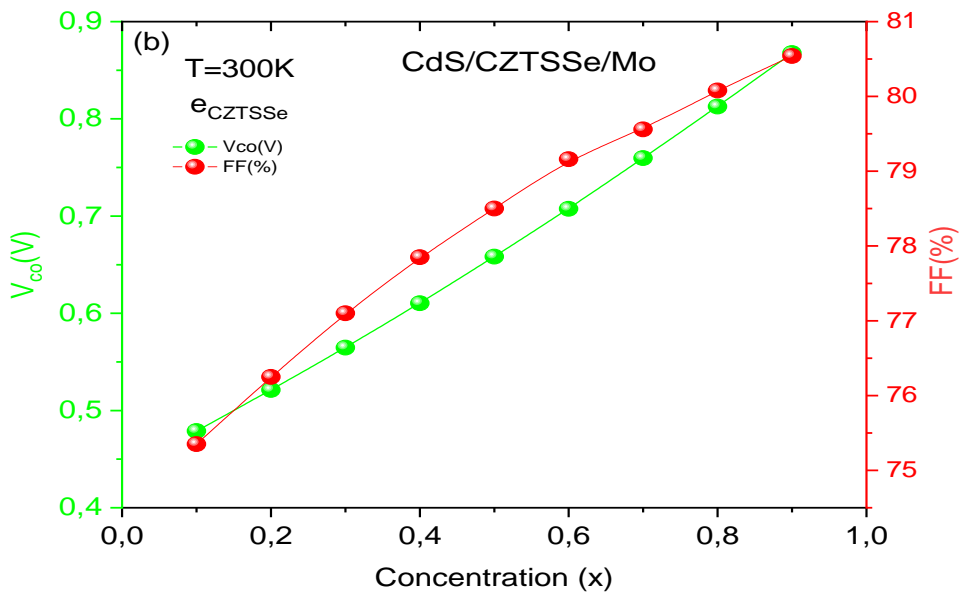
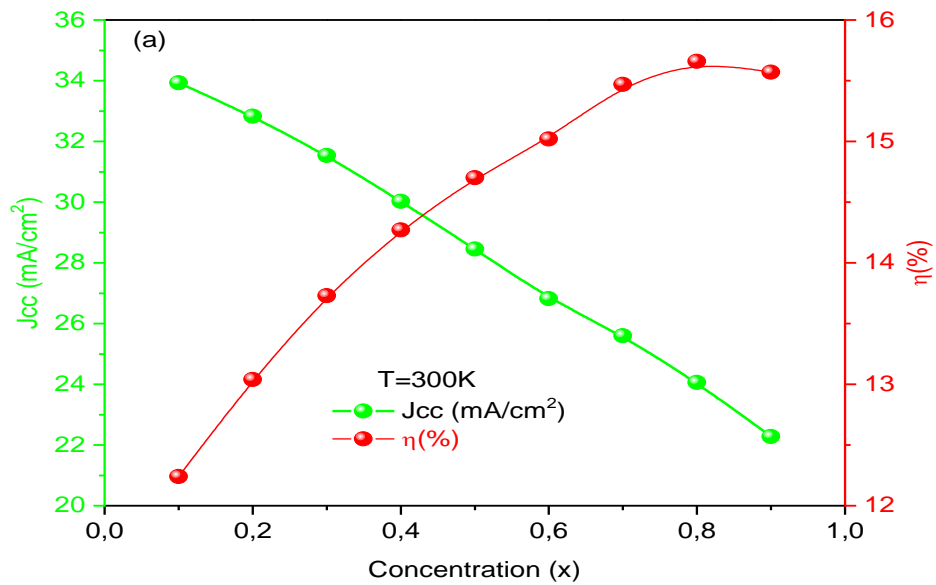
La figure III.1 représente la variation de rendement quantique externe en fonction de la longueur d'onde pour plusieurs concentrations de sulfure. On observe que la valeur de rendement quantique externe augmente dans la gamme [300 ; 550] nm jusqu'à une valeur maximale de EQE= 88 %. Nous notons également que le meilleur résultat peut être obtenu en termes de rendement quantique dans la gamme de [450 ; 600] nm. Ensuite, nous remarquons que la valeur diminue jusqu'à 0 dans la gamme [880 nm ; 1200 nm] car  $E_{\text{photon}} < E_g$  donc pas d'absorption. On constate que lorsque x augmente on a un décalage de EQE vers les petites longueurs d'onde.

### III.3.2. Variation de caractéristique J-V de la structure CdS/ CZTS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub> en fonction de la concentration du sulfure :



**Figure III.2** : variation de caractéristique J-V pour différentes valeurs de concentration de sulfure.

La figure III.2 représente la variation de la densité de courant en fonction de la tension pour plusieurs concentrations de sulfure. Lorsque la concentration de sulfure augmente la tension de circuit ouvert augmente. Par exemple, pour  $x=0,3$  on a trouvé  $V_{co}=0,56V$  et pour  $x=0,7$  on a trouvé  $V_{co}=0,76V$ , avec une variation de  $\Delta V_{co}=0,2V$ . Et pour la densité de courant de court-circuit, le  $J_{cc}$  diminue avec l'augmentation de concentration du sulfure. Par exemple, pour  $x=0,3$  on trouve  $J_{cc} = 31,51 \text{ mA/cm}^2$  et pour  $x=0,7$ , le  $J_{cc}$  est de  $25,59 \text{ mA/cm}^2$ , avec une variation de  $\Delta J_{cc} = 5,91 \text{ mA/cm}^2$ .

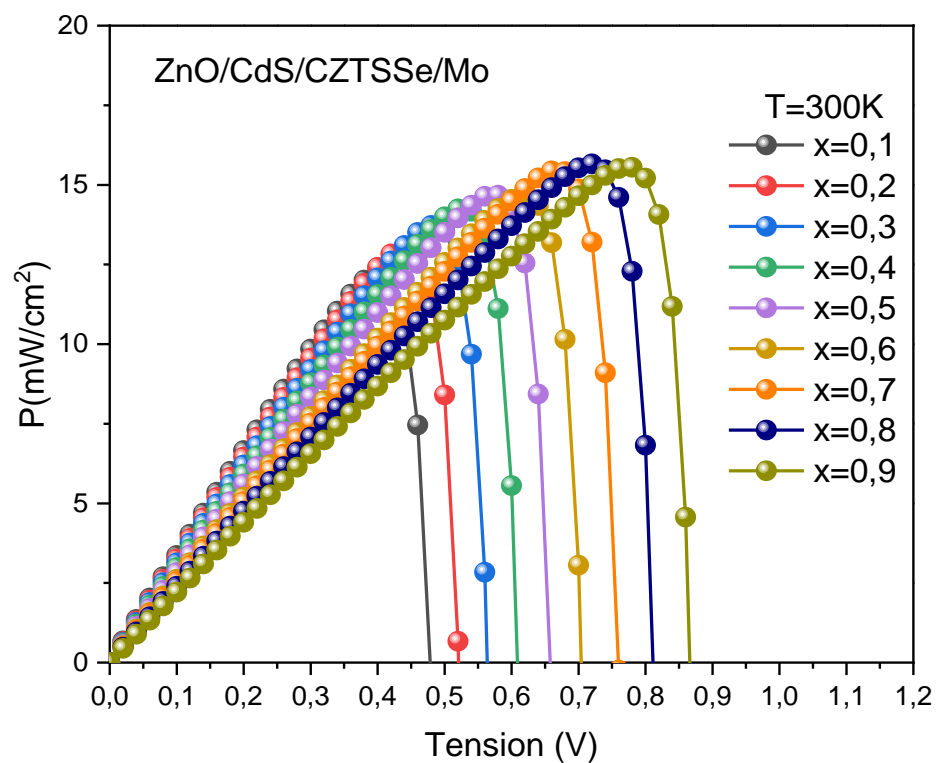


**Figure III.3 :** a) variations la densité de courant de court-circuit et rendement en fonction de concentration de sulfure. b) variation de tension de cout circuit et facteur de forme en fonction de concentration de sulfure.

Figure III.3 a) représente la variation de la densité de courant de court-circuit et le rendement en fonction de la concentration de sulfure, On note que lorsque la concentration augmente de 0.1 à 0.9, le rendement augmente et la densité de courant de court-circuit diminue, par exemple pour une concentration  $x=0.2$  on trouve  $\eta=13.52\%$  et  $J_{cc}=32.82\text{mA/cm}^2$ ; et pour une concentration  $x=0.6$  on obtient  $\eta=15.02\%$  et

$J_{cc}=26.82$ . On observe que si  $x=0.8$  on obtient un meilleur rendement égal 15.66%. **b)** représente la variation de tension de circuit ouvert et de facteur de forme en fonction de la concentration de sulfure. Il y a une augmentation significative du facteur de forme FF et des tensions en circuit ouvert VCO en parallèle avec l'augmentation des valeurs de concentration de sulfure.

### III.3.3. Variation de caractéristique P-V de la structure CdS/ CZTS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub> en fonction de la concentration du sulfure :



**Figure III.4:** Variation de caractéristique P-V pour différentes valeurs de concentration de sulfure.

La figure III.4 représente la variation de puissance en fonction de tension pour différentes valeurs de concentrations de sulfure à une température  $T=300K$ . On remarque une augmentation de puissance dans l'intervalle  $[0V \text{ à } 0.9V]$  pour plusieurs valeurs de concentration  $x$ ; ensuite on remarque une augmentation de tension pour plusieurs concentrations de sulfure.

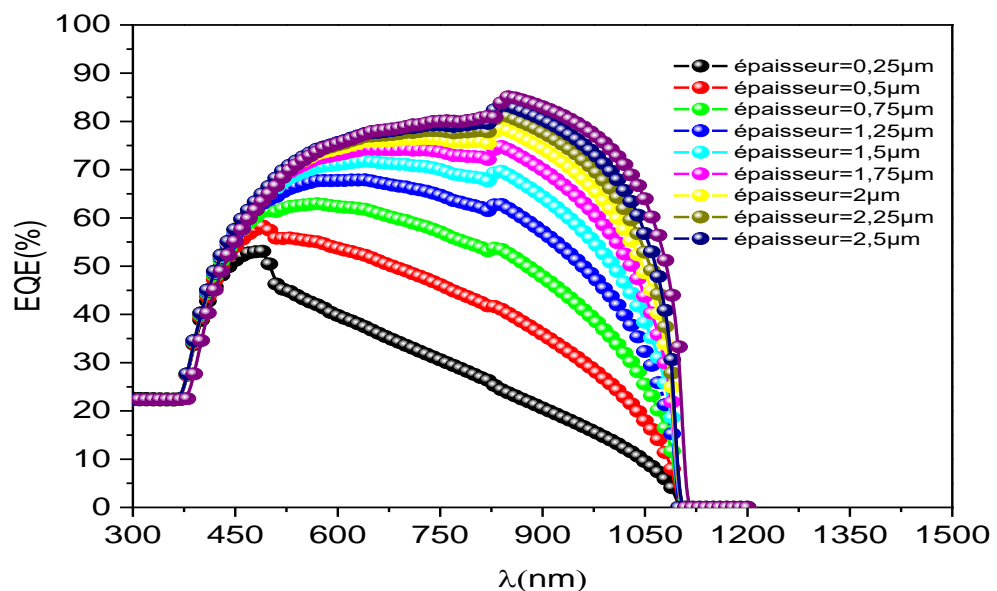


### III.4 Effet de l'épaisseur sur les caractéristiques J-V de la structure CdS/CZTS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub> pour x=0.3 avec $\epsilon_{xx}=3.7\%$ sous éclairement et T=300K:

**Tableau III.4:** résultats finaux de l'effet de l'épaisseur sur la structure CdS/ CZTS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub> pour x=0.3

Epaisseur (μm)	Vco (Volt)	Jcc(mA/cm <sup>2</sup> )	FF (%)	η(%)
0,25	0,43	12,97	74,80	4,14
0,5	0,47	19,87	74,56	6,94
0,75	0,50	24,16	73,29	8,88
1	0,52	26,75	72,96	10,19
1,25	0,53	28,23	73,68	11,13
1,5	0,54	29,21	74,56	11,85
1,75	0,55	29,97	75,38	12,44
2	0,56	30,58	76,04	12,93
2,25	0,56	31,09	76,58	13,36
2,5	0,57	31,54	77,09	13,73

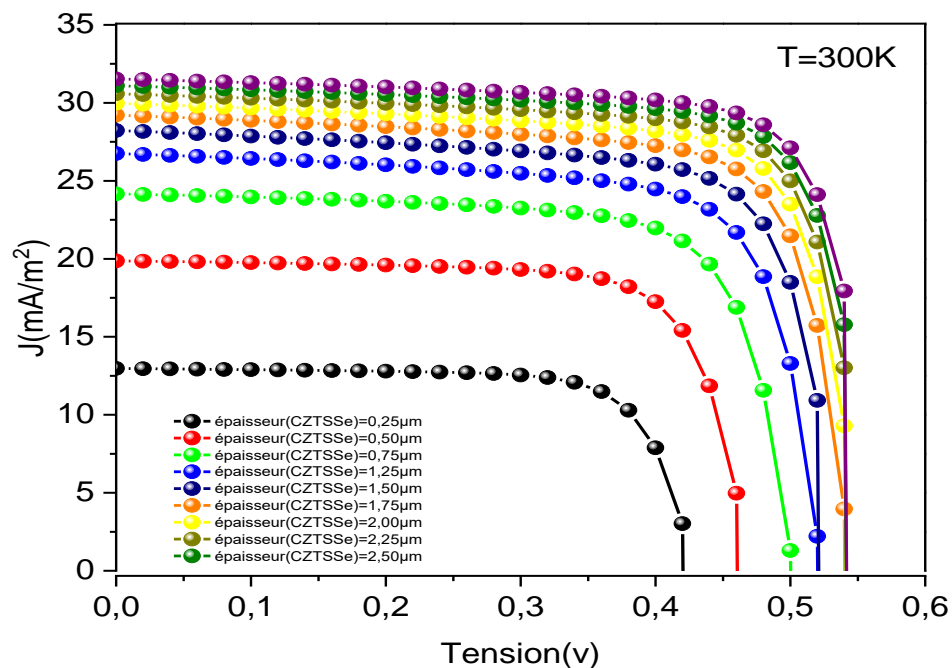
#### III.4.1 Effet de l'épaisseur sur le rendement quantique externe de la structure CdS /CZTS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub> :



**Figure III.5 :** Variation du rendement quantique externe EQE en fonction de la longueur d'onde pour différentes valeurs de l'épaisseur de la couche absorbante de CZTSSe pour x=0.3.

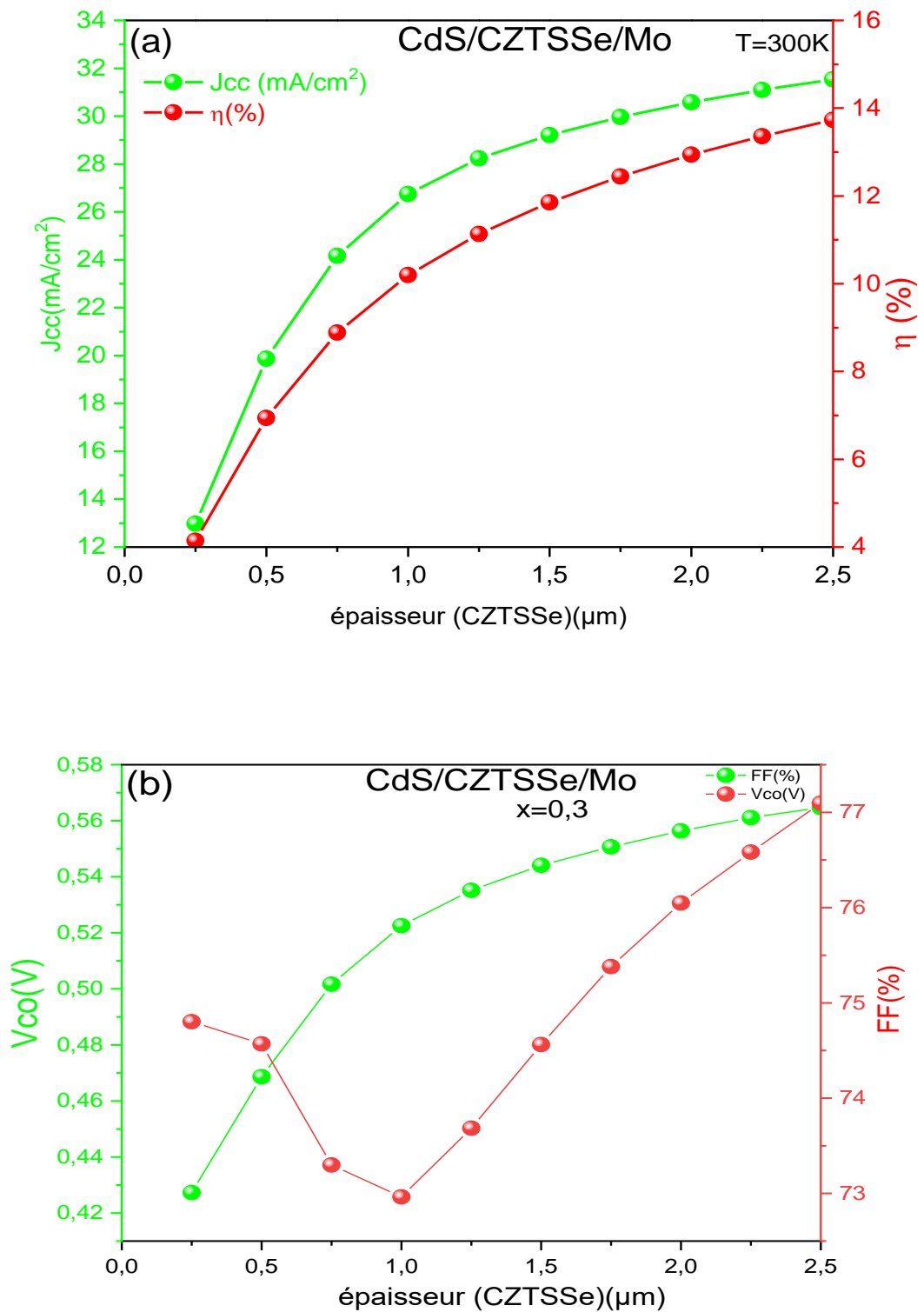
La figure III.5 représente la variation du rendement quantique externe EQE en fonction de la longueur d'onde pour différentes valeurs de l'épaisseur de la couche absorbante de CZTSSe. On note une augmentation de rendement quantique externe en parallèle avec l'augmentation de l'épaisseur. On note une augmentation de rendement quantique externe sur l'intervalle [350 ;820] nm de la longueur d'onde pour plusieurs valeurs de l'épaisseur de la couche absorbante et une concentration égale 0.3, après on remarque une diminution dans l'intervalle [820 ; 1200] nm.

### III.4.2 Effet de l'épaisseur sur les caractéristiques J-V de la structure CdS /CZTS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub> :



**Figure III.6:** Variation de caractéristique J-V pour différentes valeurs de l'épaisseur de CdS/ CZTS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub> pour x=0.3, sous éclairage et T=300K

La figure III.6 représente la variation de la densité de courant en fonction de la tension pour plusieurs valeurs de l'épaisseur de la couche absorbante de CZTSSe. On note que lorsqu'on augmente l'épaisseur 0.25 µm à 2.5 µm, la tension de circuit ouvert V<sub>co</sub> augmente, par exemple à l'épaisseur de 0.5 µm on a trouvé V<sub>co</sub>=0,47 V et pour l'épaisseur de 2 µm on a trouvé V<sub>co</sub>=0,56V, avec une variation de ΔV<sub>co</sub>=0.09 V donc pratiquement un faible effet. D'autre part, une augmentation remarquable de densité de courant pour plusieurs valeurs de l'épaisseur.

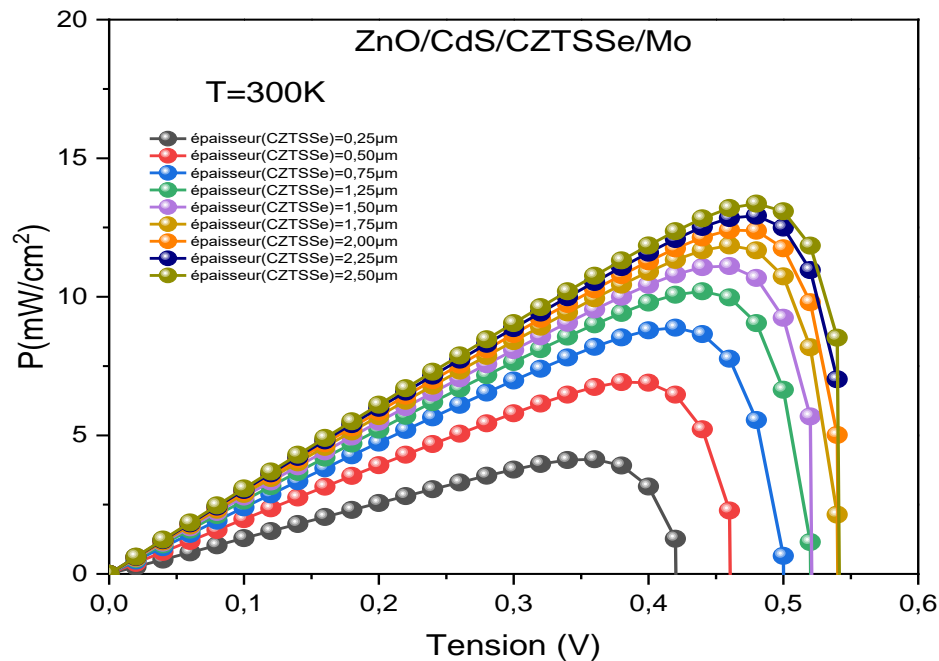


**Figure III.7** a) variation de rendement et densité de courant de court-circuit en fonction de l'épaisseur de couche absorbent pour  $x=0.3$  avec  $\varepsilon_{xx}=3.7\%$ .

b) variation de tension de court-circuit et facteur de forme en fonction d'épaisseur de couche absorbent CZTSSe

Figure III.7. a) la variation de rendement et densité de courant de court-circuit en fonction de l'épaisseur de la couche absorbante. On remarque une nette augmentation de densité de courant de court-circuit et de rendement. Par exemple pour l'épaisseur de  $0.25\mu\text{m}$   $J_{cc}=12.97\text{ mA/cm}^2$  et  $\eta=4\%$  et pour l'épaisseur de  $2\mu\text{m}$  on obtient  $J_{cc}=31.35\text{ mA/cm}^2$  et  $\eta=13\%$  avec une variation de  $\Delta J_{cc}=18.38\text{ mA/cm}^2$ . b) représente la variation de tension de circuit ouvert et le facteur de forme en fonction de l'épaisseur de couche absorbante CZTSSe. On note une augmentation de tension de circuit ouvert, par contre il y a une diminution du facteur de forme sur  $[0.25 ; 1]\mu\text{m}$  de l'épaisseur, après on note une augmentation de facteur de forme.

### III.4.3 Effet de l'épaisseur sur les caractéristiques P-V de la structure CdS /CZTS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub> :



**Figure III.8:** variation de caractéristique P-V pour différentes valeurs d'épaisseur de structure CdS/ CZTS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub> pour  $x=0.3$

Figure III.8 représente la variation de la puissance en fonction de la tension pour différentes valeurs de l'épaisseur. On remarque une augmentation de la puissance et de tension avec l'augmentation de l'épaisseur. On remarque que l'épaisseur a un effet sur la puissance et la tension.

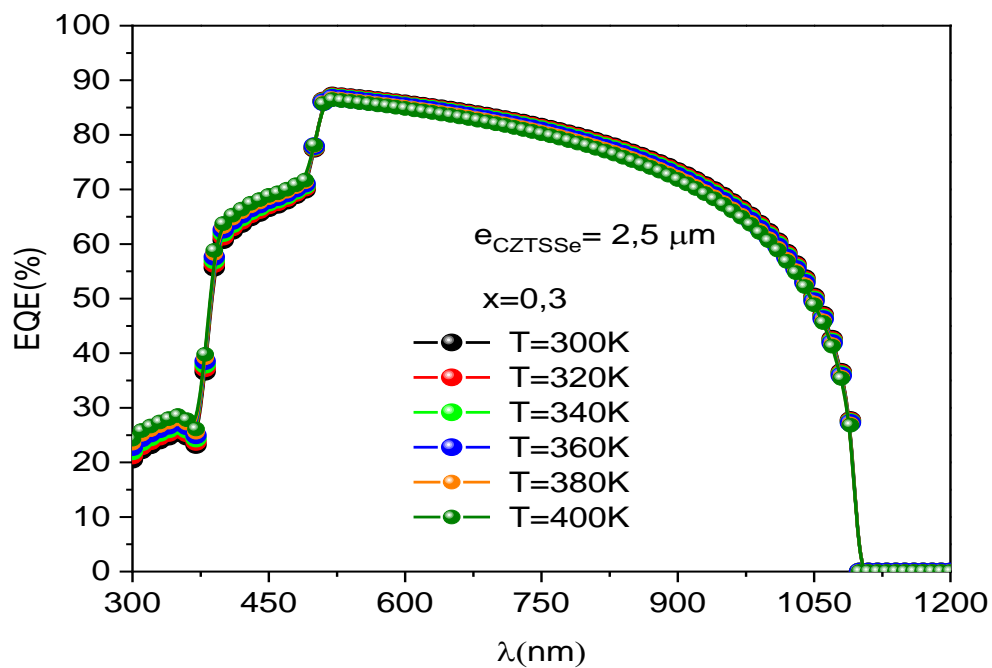
### III.5 Effet de Température sur la caractéristique J-V de la structure CdS / CZTS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub> :

**Tableau III.5:** résultats finals de l'effet de la température T sur la structure

CdS/CZTS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub> pour x=0.3 avec ε<sub>xx</sub>= 3.7 %

T(K)	V <sub>co</sub> (Volt)	J <sub>cc</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	FF (%)	Π(%)
300	0,56	31,53	77.10	13.73
320	0.51	31,49	75.50	12.35
340	0.47	31,44	73.73	10.96
360	0.42	31,38	71.55	9.57
380	0.37	31,32	68.95	8.19
400	0.33	31,24	65.92	6.83

#### III.5.1 Effet de la Température sur le rendement quantique externe de la structure CdS / CZTS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub> :

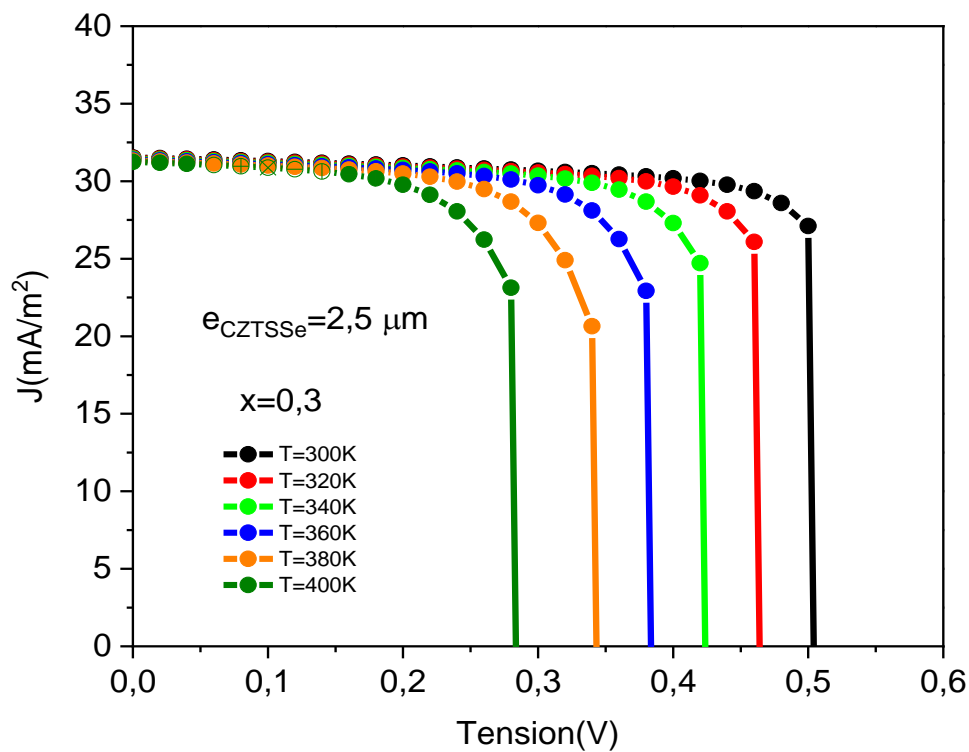


**Figure III.9 :** variation du rendement quantique externe EQE en fonction de la longueur d'onde pour plusieurs valeurs de température pour x=0.3

La figure III.9 représente variation de rendement quantique externe en fonction de la longueur d'onde pour plusieurs valeurs de températures de fonctionnement pour la concentration x=0.3 (la valeur optimale). On remarque que l'efficacité quantique externe

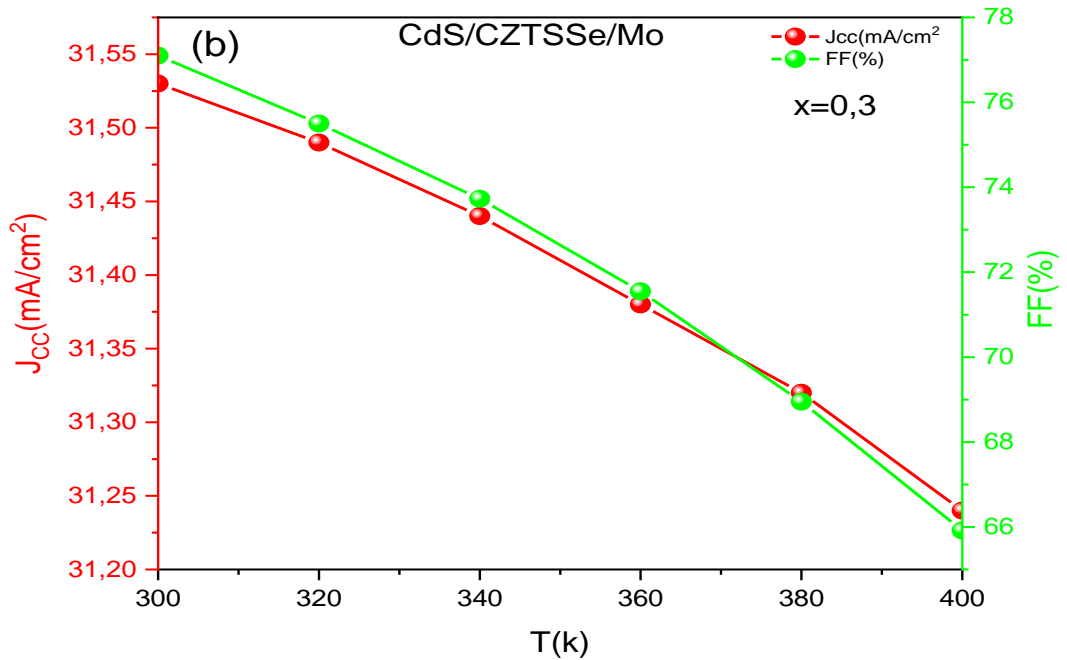
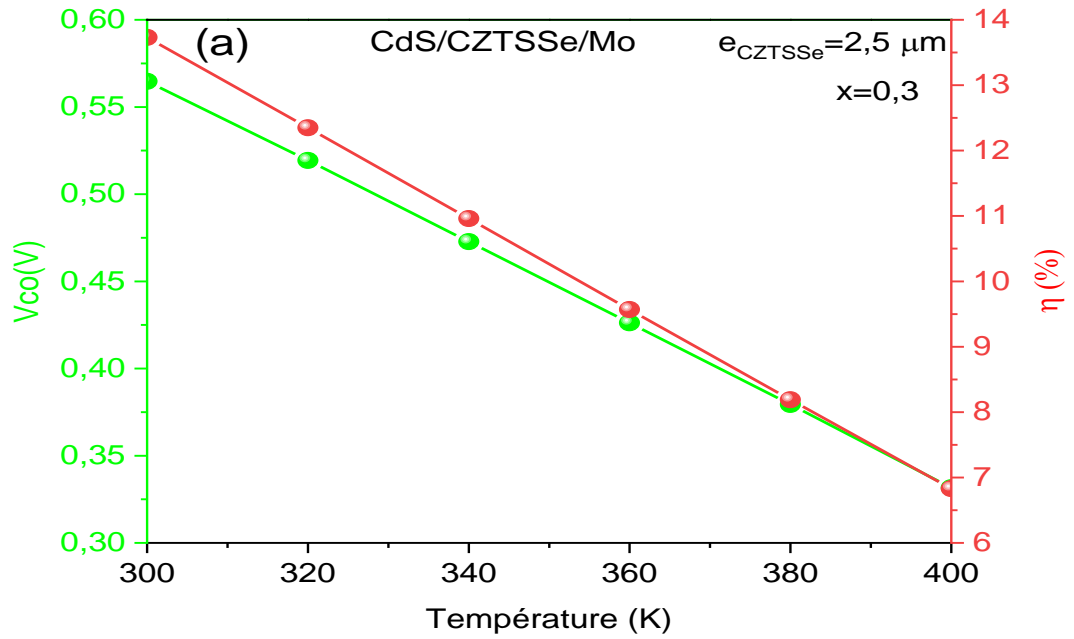
est presque la même pour toutes les valeurs de température, ce qui signifie que la température n'a pas une grande influence sur le rendement quantique externe. On note que dans l'intervalle de [300 ; 500] nm, le rendement quantique externe augmente avec une valeur maximale de 88 %, et dans l'intervalle de [500 ; 1100] nm le rendement quantique externe est diminué jusqu'à  $EQE = 0\%$ . On constate que notre structure est résistive à la haute température due à l'absence de l'effet sur EQE.

### III.5.2 Effet de température sur les caractéristiques J-V de la structure CdS / CZTS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub>:



**Figure III.10 :** variations du J-V pour plusieurs températures de structure CdS/CZTS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub> pour x=0.

La figure III.10 représente la variation du J-V pour plusieurs températures de fonctionnement pour x=0.3. On constate que la température n'a pas une grande influence sur la densité de courant. Par contre, elle influe sur la tension. Plus la température augmente plus le V diminue (effet direct) car la dépendance avec le courant inverse de saturation.



**Figure III.11** : a) variation de tension de circuit ouvert et de rendement en fonction de température. b) variation de densité de courant de court-circuit et de facteur de forme en fonction de température.

La figure III.11 représente a) variation de tension de circuit ouvert et rendement en fonction de la température. On remarque une nette diminution pour le rendement et de la tension circuit ouvert ; en parallèle avec l'augmentation de la température. b) variation de densité de courant de court-circuit et facteur de forme en fonction de température On note une diminution de FF et de  $J_{cc}$  avec l'augmentation de la température. On conclue que la température a un effet direct sur les quatre grandeurs et on obtienne les meilleures valeurs à  $T=300$  K.

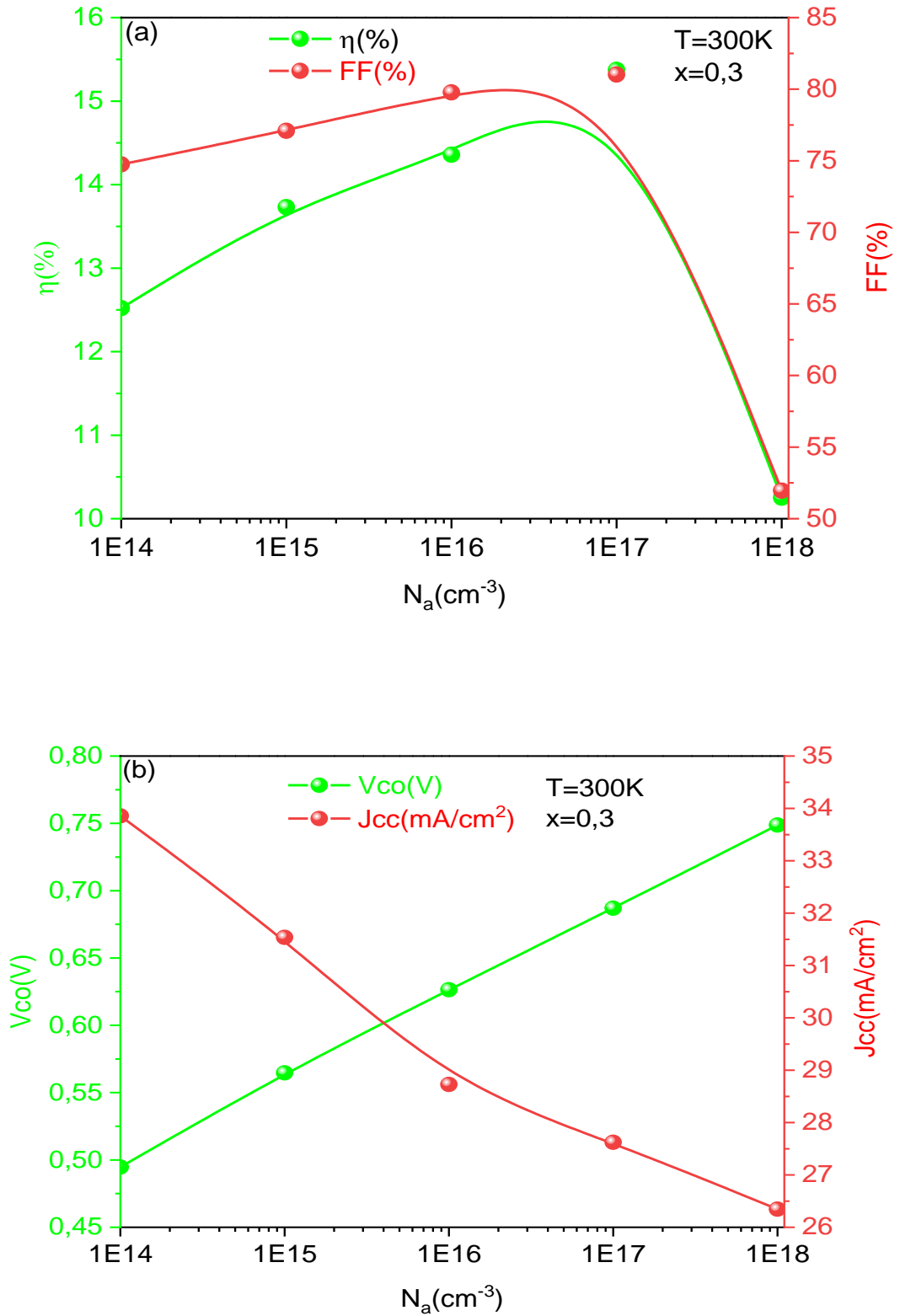
### III.6 Effet de dopage sur les caractéristiques J-V de la structure CdS / CZTS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub> pour x=0.3 et T=300K :

**Tableau III.6 :** effet dopage de structure CdS/CZTSSe pour x=0.3

$N_a$	Vco (Volt)	Jcc(mA/cm <sup>2</sup> )	FF (%)	$\eta$ (%)
$10^{14}$	0,49	33,85	74,75	12,52
$10^{15}$	0,56	31,53	77,09	13,73
$10^{16}$	0,62	28,72	79,77	14,35
$10^{17}$	0,68	27,62	81,01	15,37
$10^{18}$	0,74	26,34	51,96	10,25

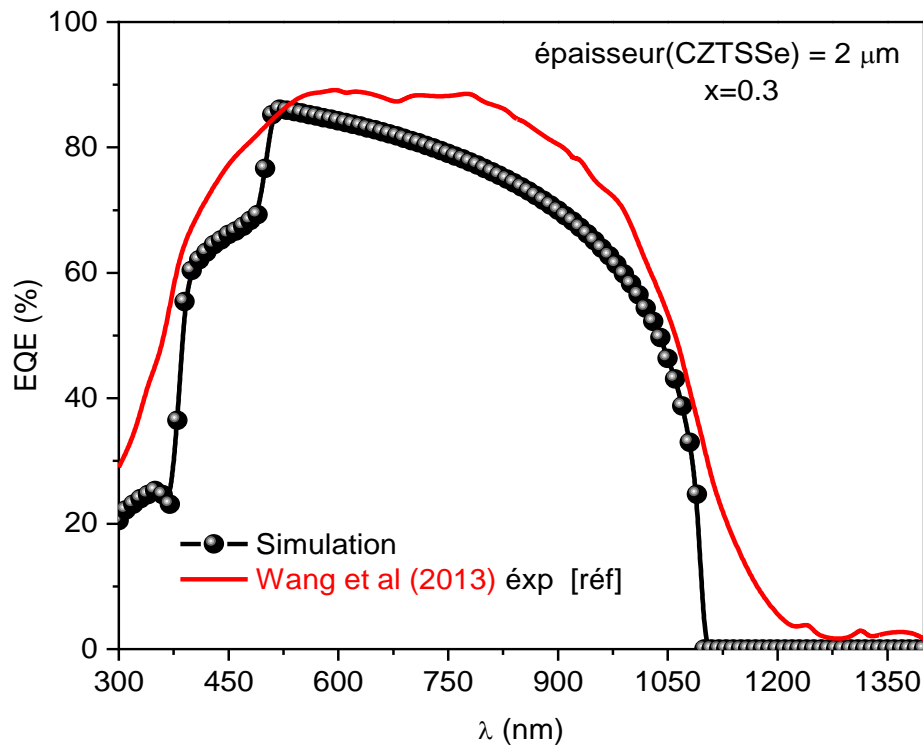
La figure III.12. a) représente la variation de facteur de forme et du rendement en fonction de dopage de la couche absorbante. On remarque une augmentation de rendement et de facteur de forme dans l'intervalle [ $10^{14}$ ;  $10^{17}$ ]  $\text{cm}^{-3}$  de dopage ; est diminué dans l'intervalle [ $10^{17}$ ;  $10^{18}$ ]  $\text{cm}^{-3}$ , par exemple si  $N_a=10^{14} \text{ cm}^{-3}$  on a FF=74.752% et le rendement égale 14.25% si on change à  $N_a=10^{18} \text{ cm}^{-3}$  on aura FF=51,96%et le rendement égale 10.25. b) variation de la densité de courant de court-circuit et la tension de circuit ouvert en fonction de dopage de la couche absorbante. On note que lorsque le dopage varié de  $10^{14} \text{ cm}^{-3}$  à  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , la tension de circuit ouvert Vco augmente. Par exemple pour un dopage de  $10^{14} \text{ cm}^{-3}$  on trouve Vco=0.49V et pour un dopage de  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  on obtient Vco=0.63V. On a une variation de  $\Delta V_{co}=0.14$ V, par contre pour la densité de courant de court-circuit que diminue dans l'intervalle [ $10^{14}$ ;  $10^{16}$ ]  $\text{cm}^{-3}$ .





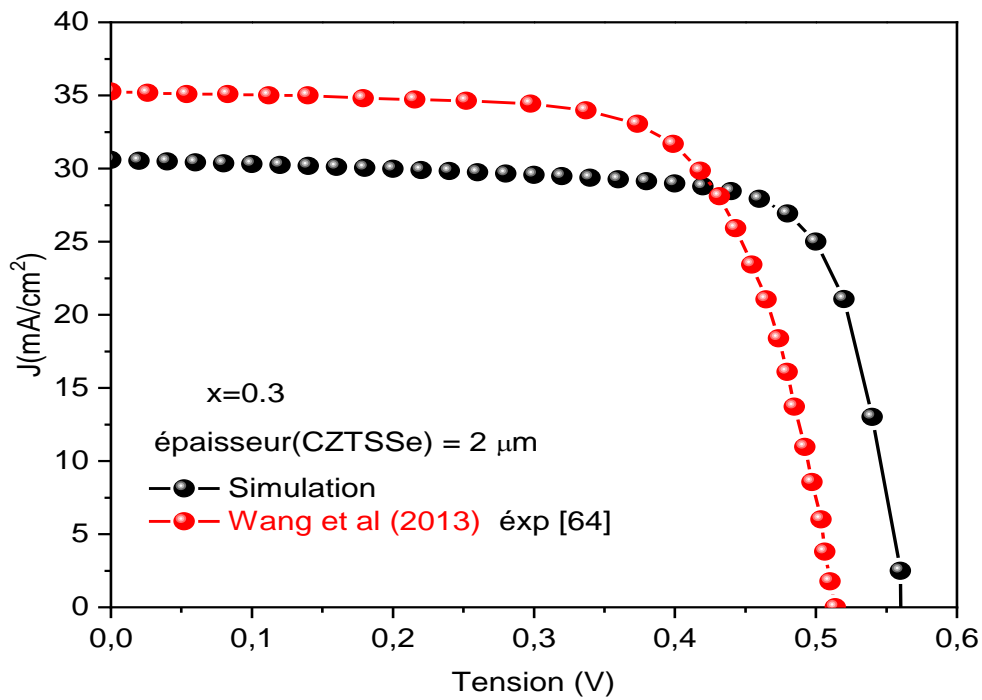
**Figure III.12** a) variation de rendement et de facteur de forme en fonction de dopage de la couche absorbante. b) variation de la densité de courant de court-circuit et la tension de circuit ouvert en fonction de dopage de la couche absorbante.

### III.7 validations des résultats de la structure CdS / CZTS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub> avec ceux de la référence [64] :



**Figure III.13 :** variation de rendement quantique externe en fonction de la longueur d'onde pour le cas de simulation et l'expérimental de couche absorbant CZTSSe pour x=0.3

La figure III.13 représente la variation du rendement quantique externe en fonction de la longueur d'onde pour le cas de simulation et de l'expérimental de couche absorbant CZTSSe pour x=0.3. On observe que les deux graphes sont assez proches. Nous remarquons une augmentation des valeurs du rendement quantique externe dans l'intervalle [300-600nm] de la longueur d'onde jusqu'à une valeur maximale de 90% pour les deux graphes. Ensuite on remarque aussi une diminution entre dans l'intervalle [600 ; 1250] nm de la longueur d'onde pour les deux jusqu'aux EQE=0%.



**Figure III.14 :** variation de caractéristique J-V pour  $x=0.3$  en l'absence et la présence de la couche de Si.

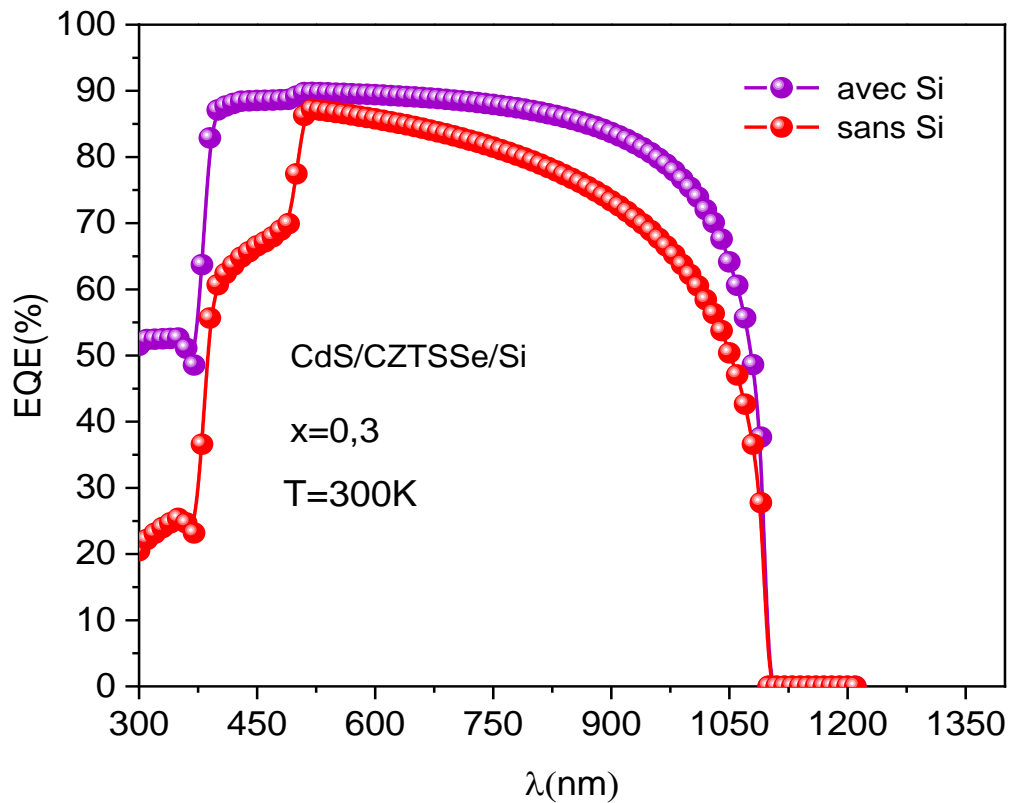
La figure III.14 représente les variations de caractéristique J-V pour  $x=0.3$  en absence et en présence de la couche de Si. On remarque que les deux graphes sont presque les mêmes et les résultats sont proches. On remarque que le  $J_{en\ présence\ de\ Si}$  est légèrement plus élevé que le  $J_{en\ absence\ de\ cette\ couche}$ . On remarque aussi que les valeurs de tension sont très proches.

**Résultat de simulation de structure ZnO/CdS/CZTSSe :**

**Tableur III.7:** Résultat de simulation de structure ZnO/CdS/CZTSSe.

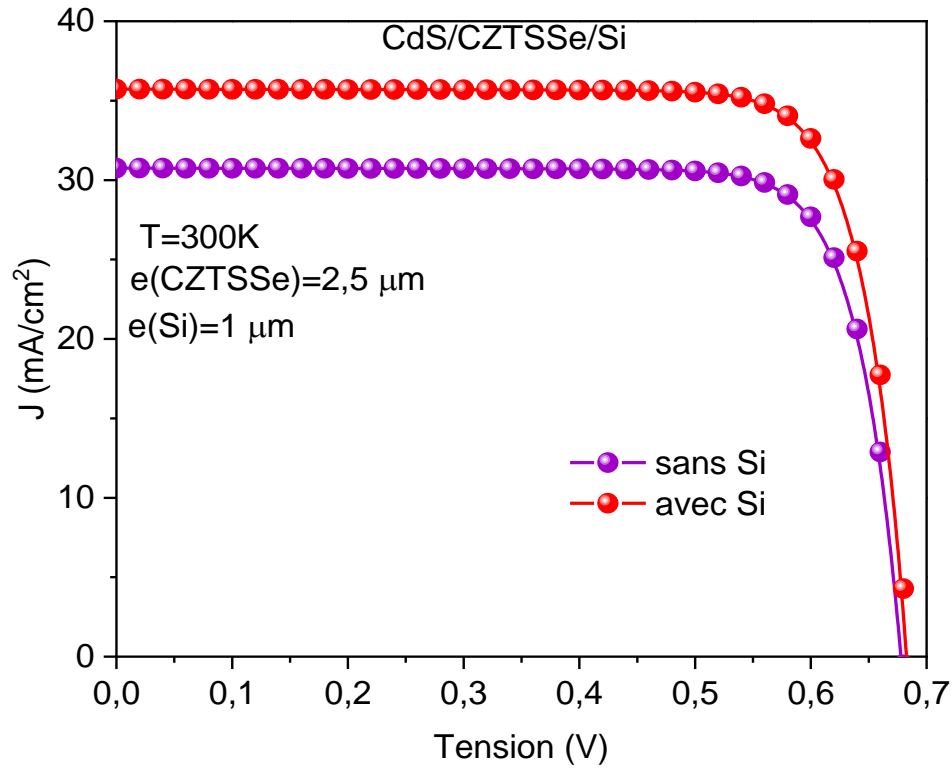
Structure CZTSSe	V <sub>co</sub> (Volt)	J <sub>cc</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	FF (%)	η (%)
ZnO/CdS/CZTSSe	0,55	30,58	76,04	12,93
ZnO/CdS/CZTSSe [64]	0.51	35.20	69.80	12.60

### III.8 Effet de la couche de p-Si sur les performances des cellules solaires CZTSSe :



**Figure III.15** : variation du rendement quantique externe en fonction de la longueur d'onde de la structure avec et sans la couche p-Si.

La figure III.15 représente la variation du rendement quantique extrême en fonction de la longueur d'onde dans deux cas avec et sans Si. On note que les valeurs d'EQE avec la couche de silicium sont proches des valeurs du rendement quantique externe sans la couche de silicium Si.



**Figure III.16 :** variation de caractéristique J-V du structure avec et sans p-Si pour  $x=0.3$ .

Figure III.16 représente la variation de caractéristique J-V pour  $x=0.3$  de la structure avec et sans la couche p-Si. On constate que la couche de silicium a un effet sur la densité de courant bien qu'ils n'affectent pas de manière significative sur la tension.

**Tableaux III.8 :** Résultats finaux de simulation pour la structure étudiée avec et sans Si.

Structure CZTSSe	$V_{co}$ (Volt)	$J_{cc}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	FF (%)	$\eta$ (%)
ZnO/CdS/CZTSSe	0,5647	31,53	77,09	13,73
ZnO/CdS/CZTSSe/Si [64]	0,6843	35,72	80,81	19,76

### III.9 Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons fait une simulation d'une cellule solaire à base de CZTSSe en utilisant deux différentes couches absorbantes CZTSSe et Si. Pour le meilleur rendement électrique. Nous avons simulé les paramètres de sortie d'une cellule solaire à

base de CZTSSe en essayant de trouver les paramètres optimaux, donnant les meilleures caractéristiques de sortie. Nous avons alors, étudié l'effet de concentration et les l'effet d'épaisseur et de la température et dopage chaque couche sur la caractéristique I-V-P et EQE ainsi que sur le rendement électrique. Nous avons constaté que les paramètres, épaisseur et concentration de sulfure et dopage, ont un impact très significatif sur l'amélioration du rendement de la conversion électrique. Effet, de cette étude nous a permis d'optimiser le rendement électrique de la structure ZnO/CdS/CZTSSe et ZnO/CdS/CZTSSe/Si Nous pouvons dire que les paramètres de chaque couche absorbent jouent un rôle très important vis-à-vis des performances du dispositif étudié et en particulier dans l'amélioration du rendement de conversion des cellules solaires à base CZTSSe.

Le CZTSSe possède la plus grande efficacité parmi les groupes de cellules ce qui a été choisi pour une étude plus approfondie. Un silicium de type P (p-Si) d'une épaisseur d'un micron est inséré comme deuxième absorbeur déposé sur un substrat et un contact arrière. Cette couche agit comme un champ de surface arrière. Des recherches théoriques récentes montrent l'effet bénéfique de la couche de silicium de type p pour réaliser des cellules solaires à base de CIGS. Les résultats indiquent que la couche de silicium agit comme une couche absorbante. Ainsi, plus de transporteurs et l'intervention de lumière améliorent les performances des cellules solaires. De plus, cette couche peut être bon contact avec le molybdène ou l'oxyde de molybdène. Donc cela peut refaire la connexion, des cellules solaires plus en réduisant la recombinaison des porteurs au contact arrière.

# **Conclusion**

## **Générale**

## Conclusion générale

L'énergie solaire photovoltaïque provient de la transformation directe d'une partie du rayonnement solaire en énergie électrique. Cette conversion d'énergie s'effectue par le biais d'une cellule dite photovoltaïque, basée sur un phénomène physique appelé effet photovoltaïque qui consiste à produire un courant lorsque la surface de cette cellule est exposée à la lumière.

En effet, les propriétés intrinsèques de la cellule sont très importantes et influencent largement les performances de celle-ci telle que la température de fonctionnement, les épaisseurs des couches composant la cellule. Ceci est illustré dans les caractéristiques I-V, avec un rendement de conversion optimal pour une couche absorbante CZTSSe(p) à 2.5 $\mu\text{m}$  épaisseur, et une épaisseur de la 2<sup>ème</sup> couche absorbante Si(p) de 1 $\mu\text{m}$  et une température de 300 K.

Dans ce travail de mémoire, nous avons fait une optimisation par la simulation de quelques paramètres optoélectronique de CZTSSe et aussi la modélisation des cellules solaires à base de ce nouveau matériau sans et avec le Si qui est considéré comme un deuxième absorbeur dans le cadre des cellules solaire photovoltaïque en couches minces. La simulation est effectuée à l'aide du logiciel SCAPS.

En perspectives, l'étude expérimentale des résultats de la simulation de la cellule solaire étudiée dans différentes concentrations, différentes températures, différents dopages et pour différentes épaisseurs.

À travers la caractéristique (J-V) de la cellule nous avons obtenu les différentes caractéristiques photovoltaïques de la cellule à savoir : le courant de court-circuit  $J_{sc}$ , la tension de circuit ouvert  $V_{oc}$ , le facteur de forme FF et le rendement de conversion  $\eta$  et le rendement quantique externe avec deux structures  $\text{ZnO/Cds/CZTSSe/Si}$  et  $\text{ZnO/Cds/CZTSSe}$ .

Le rendement obtenu par cette structure  $\text{ZnO/Cds/CZTSSe/Si}$  est meilleur en le comparant avec le rendement de la structure  $\text{ZnO/Cds/CZTSSe}$  qui est égal à 19.76%. Le rendement peut être amélioré, si on utilise les structures à doubles et triple et quadruple jonction qui sont actuellement à 40%, également de nouveaux matériaux.



## Les références :

- [1] Daranfed Ouarda, « Elaboration et caractérisation de couches absorbantes des cellules solaires en couches minces à base de  $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$  », Thèse de Doctorat en Science physique, Université de MENTOURI DE CONSTANTINE 1, 2013.
- [2] B. Flèche et D. Delagnes, Energie solaire photovoltaïque, doc, juin 07
- [3] Rémi de Bettignies, « Cellules photovoltaïques organiques dérivées de nouveaux systèmes conjugués », Université d'Angers, France, 2003.
- [4] vu le 01/08/2020 : <https://www.schoolmouv.fr/cours/les-ondes-sonores-et-electromagnetiques-applications-medicales/exercices/la-lumiere-visible>
- [5] cours « le photovoltaïque fonctionnement et technologies », Institut bruxellois pour la gestion de l'environnement, 2010.
- [6] vu le : 01/08/2020. <https://www.planete-energies.com/fr/medias/decryptages/la-cellule-photovoltaïque-comment-ca-marche>
- [7] Duchatelet . A , « Synthèse de couches minces de  $\text{Cu}(\text{In},\text{Ga})\text{Se}_2$  pour cellules solaires Par électro dépôt d'oxydes mixtes de cuivre-indium-gallium », Thèse de Doctorat, université de Lille1, 2012.
- [8] vu le : 05/08/2020. [http://www.optique-ingenieur.org/fr/cours/OPI\\_fr\\_MO5\\_CO2/co/contenu\\_02.html](http://www.optique-ingenieur.org/fr/cours/OPI_fr_MO5_CO2/co/contenu_02.html)
- [9] vu le : 05/08/2020. <http://panneaux-solaires.e-monsite.com/pages/presentation.html>
- [10]. MENASSEL HalouiHafsia, « Contribution à la conception et modélisation d'un capteur solaire hybride photovoltaïque thermique à base de cellules solaires en couches minces », Thèse de Doctorat, Université d'OUM ELBOUAGHI.
- [11] vu le : 01/10/2020. <http://panneaux-solaires.e-monsite.com/pages/presentation.html>
- [12] Baboulla Nadia, « L'effet de l'épaisseur de la couche PEDOT:PSS sur le rendement d'une cellule solaire organique à base de P3HT/PCBM », Université Tahri Mohammed Bechar, 2018.

- [13] H. Mathieu, « Physique des semiconducteurs et des composants électroniques », 2ème Edition, Masson, 1990
- [14]. BEN ABDERRAZAK Ghania, « Etude par simulation numérique de la Cellule solaire à base de CZTS par SCAPS », Mémoire de master, Université Med Khider Biskra, 2014.
- [15]. KROUR Safia, « optimisation des paramètres d'une cellule photovoltaïque par les algorithmes génétiques », Mémoire de Magister, université de FARHAT ABBES STIF1, 2014.
- [16] T. Key, «Solar photovoltaic's: Expanding electric generation options», 2008
- [17] Bernard Equer, « Energie solaire photovoltaïque », physique et technologie de la conversion photovoltaïque, Volume 1 Ellipses Editions Marketing, (1993).
- [18] Lelievre Jean-François, « Elaboration de SiNx :H par PECVD : Optimisation des Propriétés Optiques », Thèse de doctorat, L'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon,2007.
- [19] V.Y. Merritt, IBM Journal de recherché et développement, 22, 353-371.1978.
- [20] C.W. Tang, Lettres de physique appliquée, 48, 183-185. 1986.
- [21] P. Peumans and S.R. Forrest, Lettres de physique appliquée, 79, and 1,126-128. 2001.
- [22] vu le : 10/08/2020,[www.prnewswire.com/news-releases/heliatek-etablit-un-nouveau-record-de-rendement-avec-des-cellules-photovoltaiques-organiques-a-132-568000051.html](http://www.prnewswire.com/news-releases/heliatek-etablit-un-nouveau-record-de-rendement-avec-des-cellules-photovoltaiques-organiques-a-132-568000051.html)
- [23] A. Ricaud, « Photopiles Solaires : De la physique de la conversion Photovoltaïque aux Filières », Matériaux et Procédés, Presses polytechniques et universitaires romandes, 1ère édition. 1997.
- [24] Selma MOSTEFA KARA, « étude et simulation de cellules photovoltaïques à couches minces a base de CIS et CIGS. » Mémoire de Magister, Université Abou-Bakr Blekaid, Tlemcen,2012.

- [25] K. Kouz, H. Cherkaoui Dekkaki, S. Cherel, B. Maljournal, C. Leger, B. Attaous, F. Cuzin, S. Aziki, « Etude d'impact environnementale et sociale cadre du projet de complexe solaire d'Ouarzazate », Agence Marocaine de l'Energie Solaire. Maroc. 2011.
- [26] J. Xue, S. Uchida, B.P. Rand and S.R. Forrest. Lettres de physique appliquées, 84, 16,3013-3015.2004.
- [27] Vu le 01/10/2020  
[:https://www.acedim.com/Cours/Modules2A/Module1/cha\\_1/cha\\_1\\_2\\_1.html](https://www.acedim.com/Cours/Modules2A/Module1/cha_1/cha_1_2_1.html)
- [28] Raphaël FILLON, « Etude des propriétés électroniques de couches minces de CZTSSe »", Thèse de doctorat, du CEA Grenoble, 2006.
- [29] Giovanni Altamura. «Development of CZTSSe thin films based solar cells», Université Joseph-Fourier, Grenoble I, 2014.
- [30] S. Chen, Gong, X. G., Walsh, A. and Wei, S. - H.,« Crystal and electronic band structure of  $\text{Cu}_2\text{ZnSnX}_4$  (X= S and Se) photovoltaic absorbers: first-principles insights», Applied Physics Letters, vol. 94, p. 41903, 2009.
- [31] Scott McClary, Caleb Miskin, Rakesh Agrawal, « CZTSSe Theory and Fabrication», Université Purdue, École de génie chimique Davidson, 2010.
- [32] O. K. Simya, A. Mahaboobbatcha and K. Balachander. «A comparative study on the performance of Kesterite based thin film solar cells using SCAPS simulation program», Superlattices and Microstructures, vol 82, pp. 248-261, Juin 2015.
- [33] E. Jo, M. Gil Gang, H. Shim, M. P. Suryawanshi, U. V. Ghorpadeet J. Hyeok Kim, «“8% Efficiency  $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S},\text{Se})_4$  (CZTSSe) Thin Film Solar Cells on Flexible and Lightweight Molybdenum Foil Substrates», ACS Matériaux appliqués et interfaces vol. 11(26) pp.23118-23124, Juin 2019.
- [34] Y. H. Khattak, F. Baig, S. Ullah, B. Mari, S. Beg and H. Ullah, « Enhancement of the conversion efficiency of thin film kesterite solar cell», Revue des énergies renouvelables et durables. 10, 033501, May 2018.
- [35] O.K. Simya, A. Mahaboobbatchaet K. Balachander, «A comparative study on the performance of Kesterite based thin film solar cells using SCAPS simulation program», Superréseaux et microstructures, vol 82, pp. 248-261, Juin 2015.

- [36] F. A. Jhuma, M. Z. Shaily, M. J. Rashid, «Towards high\_efficiency CZTS solar cell through buffer layer optimization», *Revue des énergies renouvelables et durables*, 8: 6, Mars 2019.
- [37] Xin-Gao Gong Aron Walsh Su-Huai Wei. «Structural, Electronic and Defect Properties of Cu<sub>2</sub>ZnSn (S, Se) 4 Alloys», January 2011.
- [38] Jean-Marc Bethoux, « Relaxation des contraintes dans les hétérostructures épaisses (Al,Ga)N : une piste originale pour la réalisation de diodes électroluminescentes à cavité résonante». *Matière Condensée*, Université Nice Sophia Antipolis, 2004.
- [39] Vardaan Chawla, Jefferey S. King, Evan Runnerstrom, Stacey F. Bent, Bruce M. Clemens, “Investigation of inexpensive, abundant materials for Thin Film Solar Cell applications”, *Projet de climat mondial et d’énergie ; Leland Stanford junior université-USA*.
- [40] S. Siebentritt and S. Schorr. « Kesterites a challenging material for solar cells ». *Progrès en photovoltaïque : recherche et applications*, 20(5): p 512–519, 2012.
- [41] P.M.P. Salomé, J. Malaquias, P.A. Fernandes, M.S. Ferreira, A.F. Da Cunha, J.P. Leitao, J.C. González, and F.M. Matinaga, «Growth and characterization of Cu<sub>2</sub>ZnSn(S, Se) for thin films for solar cells», *Matériaux d’énergie solaire et cellules solaires*, 101:p 147–153, 2012.
- [42] W. Shockley and H.J. Queisser, « Detailed balance limit of efficiency of p n junction solar cells », *Journal de Physique applique*, 32(3): p 510–519, 1961.
- [43] S. Chen, A. Walsh, J.-H. Yang, X.-G. Gong, L. Sun, P.-X. Yang, J.-H. Chu, and S.H. Wei, «Compositional dependence of structural and electronic properties of Cu<sub>2</sub>ZnSn (S, Se)<sub>4</sub> alloys for thin film solar cells. *Physical Review B*», 83(12):125201, 2011.
- [44] Charles J. Hages, James. Moore, Sourabh Dongaonkar, Muhammad. Alam, Mark Lundstrom, et Rakesh. Agrawal, «Photovoltaic Specialists conference (PVSC)», 38th IEEE 2012; pp 2658-2663.
- [45] S. Chen, A. Walsh, J. Yang, X.G. Gong, L. Sun, P.X. Yang, J.H. Chu, S.H. Wei, *Phys. Review. B* 83 (2011) 125201.

- [46] Shiyou Chen, X. G. Gong, Aron Walsh, and Su-Huai Wei, «Crystal and electronic band structure of  $\text{Cu}_2\text{ZnSnX}_4$  ( $X=\text{S}$  and  $\text{Se}$ ) photovoltaic absorbers: First-principles insights», *letters de Physique appliqués*, 94(4) :041903, 2009.
- [47] F. Kerkar, Calcul du gain optique d'un puits quantique à base de GaInNAs/GaAs pour son utilisation dans les télécommunications optiques émettant à une longueur d'onde de  $1.3 \mu\text{m}$ , université Saad Dahleb de Blida, 2008.
- [48] BENGHABRIT Siham, « Elaboration et caractérisation de couches minces CdS par bain chimique CBD pour application photovoltaïque », Université des Sciences et de la Technologie d'Oran Mohamed BOUDIAF, 2015.
- [49] Mathieu Halbwax. « Elaboration et caractérisation de couches de germanium épitaxié sur silicium pour la réalisation d'une photo détectrice en guide d'ondes », *Matière Condensée*, Université Paris Sud - Paris XI, 2004.
- [50] Pierre-Yves Tessier. « Les contraintes dans les couches minces déposées par pulvérisation cathodique : un moyen de mise en forme des objets en micro-technologie », Institut des matériaux Jean Rouxel (IMN), Université de Nantes, France.
- [51] Renard, C., « Hétérostructures Antimoniures/Arséniures pour les Applications Optoélectroniques dans le Moyen Infrarouge », université paris VII, 30 septembre 2005.
- [52] F. Kerkar, « Calcul du gain optique d'un puits quantique à base de GaInNAs/GaAs pour son utilisation dans les télécommunications optiques émettant à une longueur d'onde de  $1.3 \mu\text{m}$  », université Saad Dahleb de Blida, 2006.
- [53] Zhang, Y., Ning, Y., Zhang, L., Zhang, J., et al., «Design and comparison of GaAs, GaAsP and InGaAlAs quantum-well active regions for 808-nm VCSELs», *Optics Express*, 2011;19(13): 12569-12581.
- [54] Gunaicha, P. P.; Gangam, S.; Roehl, J. L. et Khare, «energetic and elastic properties of  $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}_x\text{Se}_{1-x})_4$  ( $x = 1, 0.75, 0.5, 0.25, 0$ ) alloys from first-principles computations », April 2014.
- [55] R. Beneyton, « l'incorporation du thallium dans une matrice III-V : préparation de GaTlAs et InTlAs par EJM », Thèse de doctorat, école centrale de Lyon, Novembre, 2004.

- [56] cours Absorption et diffusion optique, lance le : mars 2013, Ryad Bendoula & équipe COMiC, <https://itap.irstea.fr/wp-content/uploads/Absorption-Diffusion-Optique-R-Bendoula-SeminaireITAP-mars2013.pdf>.
- [57] B. A. Ezekoye and C. E. Okeke, « Optical Properties in PbHg STernary Thin Films Deposited by Solution Growth Method », Journal Pacifique de la science et de la technologie, Vol. 7 (2), pp. 108- 113, 2006.
- [58] Balu A. R., Nagarethinam V. S., Arunkumar N. and Suganya M., «Nanocrystalline NiO thin films prepared by a low-cost simplified spray technique using perfume tomizer», J. Electron Devices, Vol. 13, pp. 920-930, (2012).
- [59] S. Abdullahi, A. U. Moreh, B. Hamza, U. Sadiya, Z. Abdullahi, M. A. Wara, H. Kamaluddeen, M. A. Kebbe, and U. F. Monsurat, «Optical Characterization of Fluorine doped Tin Oxide (FTO) thin films deposited by spray pyrolysis technique and annealed under Nitrogen atmosphere», International Journal of Innovation and Applied Studies, Vol. 9(2), pp. 947-955, (2014).
- [60] L. A. Kosyachenko, E. V. Grushko, and X. Mathew, «Quantitative assessment of optical losses in thin film CdS/CdTe solar cells», Sol. Energy Mater. Sol. Cells, vol. 96, pp. 231237–231242, 2012.
- [61] Nima E. Gorji, Member, «Quantitative Analysis of the Optical Losses in CZTS Thin-Film Semiconductors», IEEE TRANSACTIONS ON NANOTECHNOLOGY, VOL. 13, NO. 4, JULY .2014.
- [62] Saliha Ilican a, Yasemin Caglara, Mujdat Caglara, Fahrettin Yakuphanoglu. «The effects of substrate temperature on refractive index dispersion and optical constants of CdZn (S0.8Se0.2)2 alloy thin films», Anadolu Université, Faculté de Science, Département de Physics, 26470 Eskisehir, Turkey.2009.
- [63] Hela FERJANI Synthèse,«études structurales et caractérisations physico-chimiques de nouveaux matériaux hybrides organiques-inorganiques basés sur les chlorobismuthates (III)», thèse de doctorat, Université de Tunis El-Manar, 2014.
- [64] Wei Wang, Mark T. Winkler, Oki Gunawan, TayfunGokmen ,Teodor K. Todorov ,Yu Zhu , et David B. «Mitzi. Device Characteristics of CZTSSe Thin-Film Solar Cells with 12.6% Efficiency».2013.

Annexes :

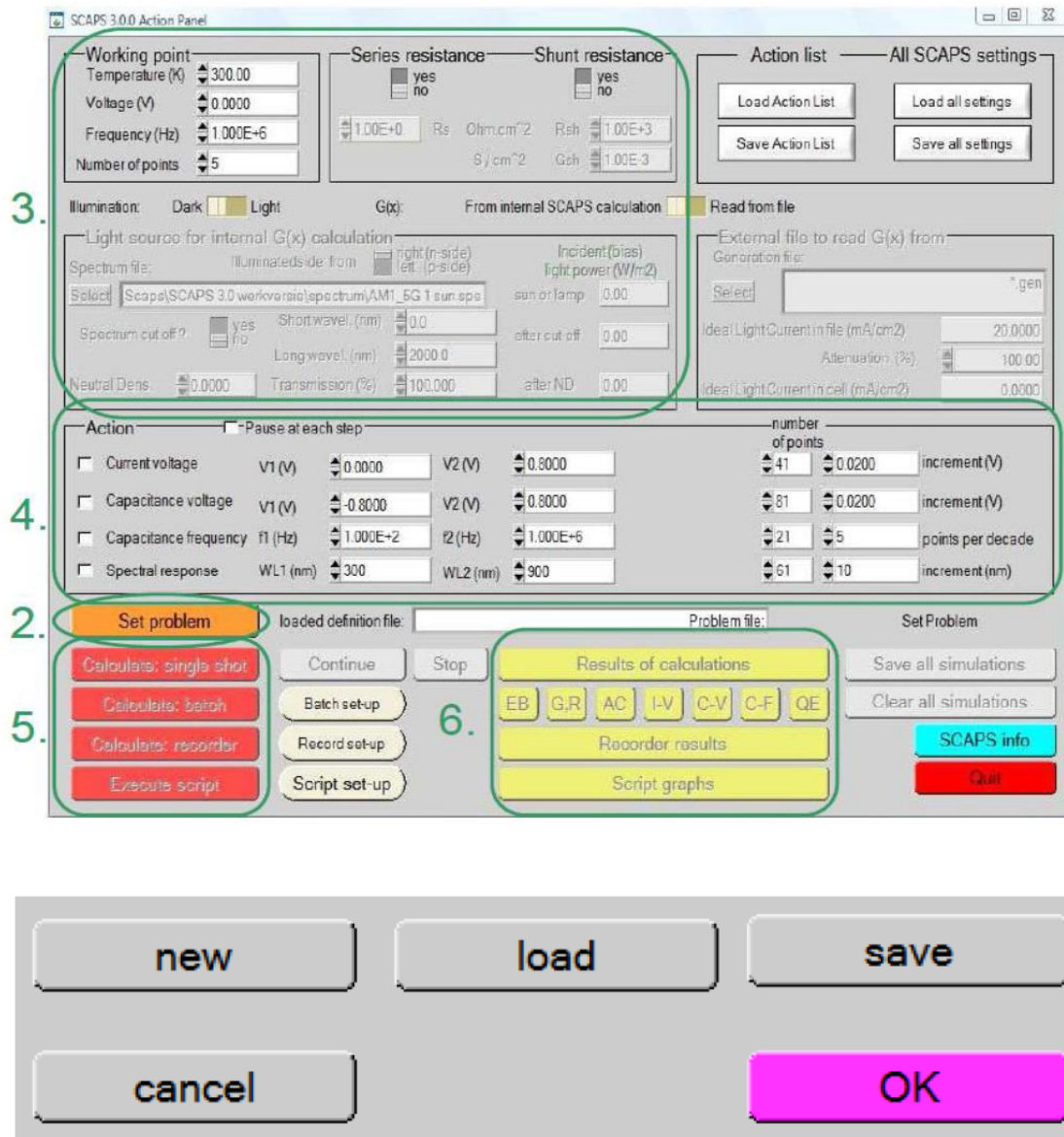


Figure A 1 : Panneau de démarrage de SCAPS, le panneau d'action ou principal.

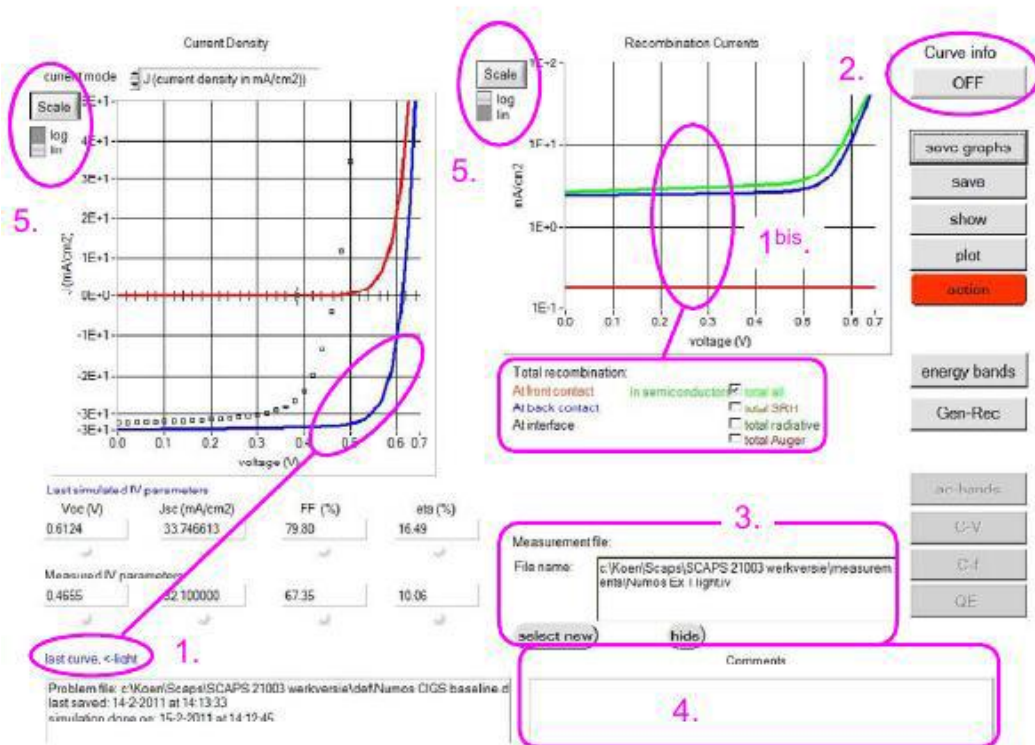
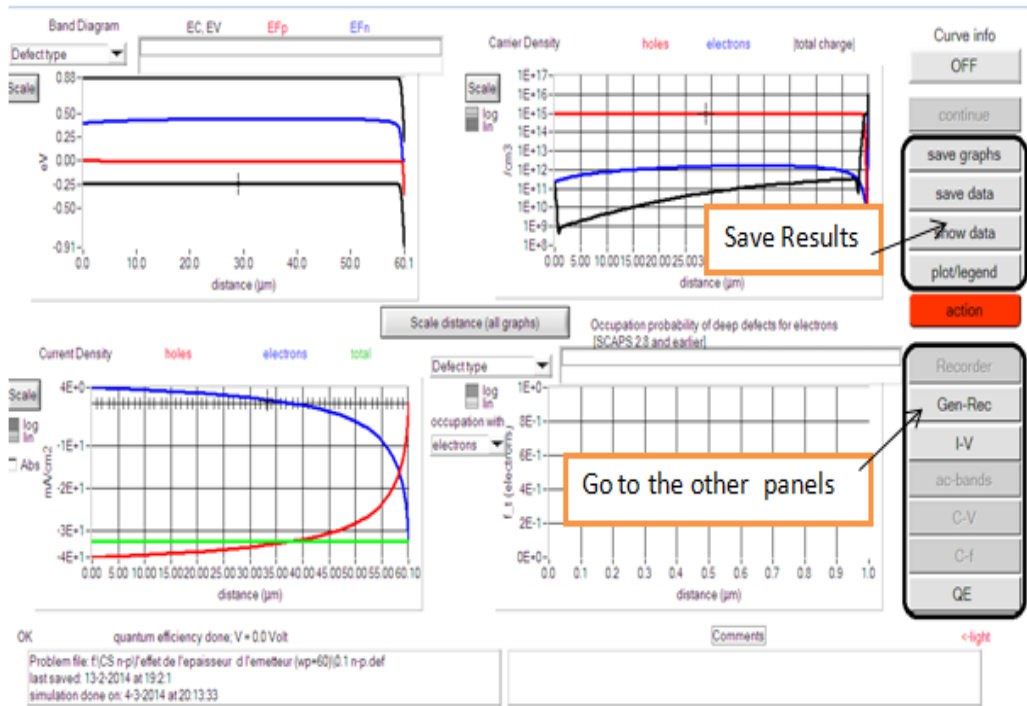
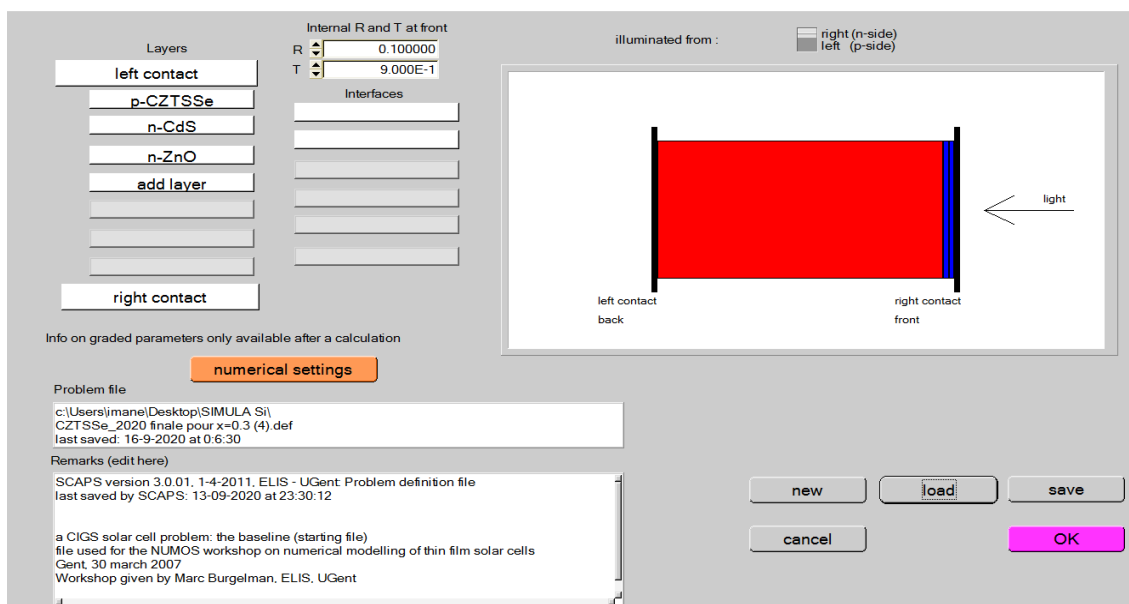
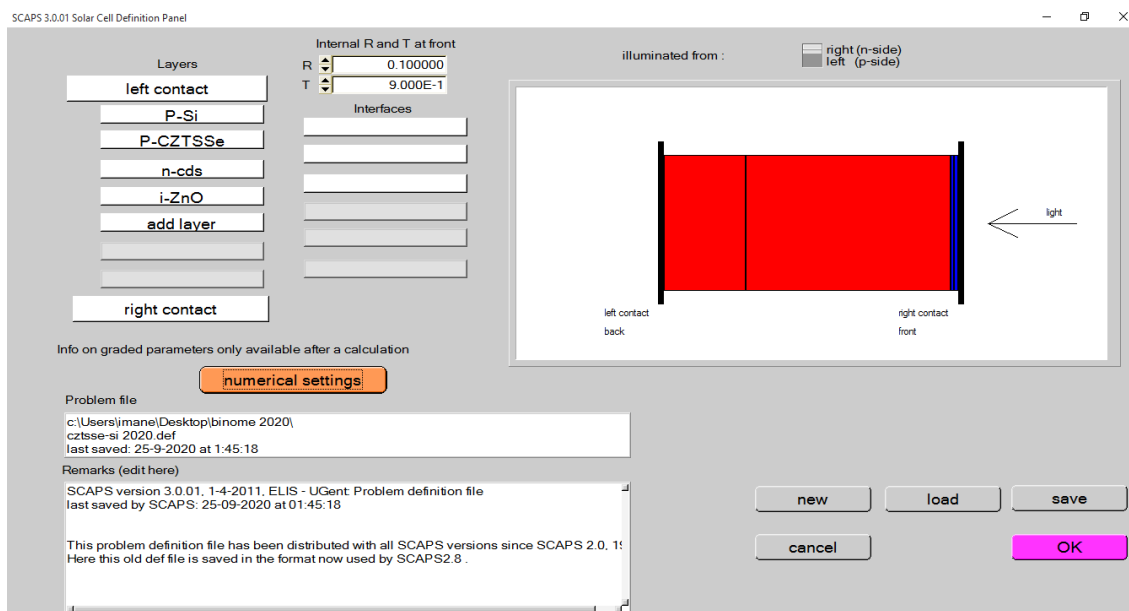


Figure A 2 : les étapes pour trouve les graphes de J-V et P-V.





**Figure A.3 :** Définition de notre structure de cellule solaire de CZTSSe/CdS/ZnO.



**Figure A.4 :** Définition de notre structure de cellule solaire de Si/CZTSSe/CdS/ZnO.

### Tableau périodique des éléments chimiques

Groupe	I A	II A											III B	IV B	V B	VI B	VII B	0	
Période	1	2											13	14	15	16	17	18	
1	Hydrogène 1 H 1,00795																		Hélium 2 He 4,002602
2	Lithium 3 Li 6,9395	Béryllium 4 Be 9,0121831	<ul style="list-style-type: none"> <li>--- nom de l'élément (gaz, liquide ou solide à 0°C et 101,3 kPa)</li> <li>--- numéro atomique</li> <li>--- symbole chimique</li> <li>--- masse atomique relative [ou celle de l'isotope le plus stable]</li> <li>--- [ CIAAW "Atomic Weights 2013" + rev. 2015 ]</li> </ul>										Bore 5 B 10,8135	Carbone 6 C 12,0106	Azote 7 N 14,00645	Oxygène 8 O 15,9994	Fluor 9 F 18,99840315	Neon 10 Ne 20,1797	
3	Sodium 11 Na 22,98976928	Magnésium 12 Mg 24,3055	III A	IV A	V A	VI A	VII A	VIII			I B	II B	Aluminium 13 Al 26,9815385	Silicium 14 Si 28,085 (1)	Phosphore 15 P 30,97376200	Soufre 16 S 32,0675	Chlore 17 Cl 35,4515	Argon 18 Ar 39,948 (1)	
4	Potassium 19 K 39,0983 (1)	Calcium 20 Ca 40,078 (4)	Scandium 21 Sc 44,955908 (6)	Titane 22 Ti 47,867 (1)	Vanadium 23 V 50,9415 (1)	Chrome 24 Cr 51,9961 (6)	Manganèse 25 Mn 54,938044	Fer 26 Fe 55,845 (2)	Cobalt 27 Co 58,933194	Nickel 28 Ni 58,6934 (4)	Cuivre 29 Cu 63,546 (3)	Zinc 30 Zn 65,38 (2)	Gallium 31 Ga 69,723 (1)	Germanium 32 Ge 72,630 (6)	Arsenic 33 As 74,921595	Sélénium 34 Se 78,971 (8)	Brome 35 Br 79,904	Krypton 36 Kr 83,798 (2)	
5	Rubidium 37 Rb 85,4678 (4)	Strontium 38 Sr 87,62 (1)	Yttrium 39 Y 88,90584	Zirconium 40 Zr 91,224 (2)	Niobium 41 Nb 92,90637	Molybdène 42 Mo 95,95 (1)	Technétium 43 Tc [88]	Ruthénium 44 Ru 101,07 (2)	Rhodium 45 Rh 102,90550	Palladium 46 Pd 106,42 (1)	Argent 47 Ag 107,8682 (2)	Cadmium 48 Cd 112,414 (4)	Indium 49 In 114,818 (1)	Étain 50 Sn 118,710 (7)	Antimoine 51 Sb 121,760 (1)	Tellure 52 Te 127,60 (3)	Iode 53 I 126,90447	Xénon 54 Xe 131,293 (6)	
6	Césium 55 Cs 132,905452	Baryum 56 Ba 137,327 (7)	Lanthanides 57-71	Hafnium 72 Hf 178,49 (2)	Tantale 73 Ta 180,94788	Tungstène 74 W 183,84 (1)	Rhénium 75 Re 186,207 (1)	Osmium 76 Os 190,23 (3)	Iridium 77 Ir 192,217 (3)	Platine 78 Pt 195,084 (6)	Or 79 Au 196,966569	Mercurie 80 Hg 200,592 (3)	Thallium 81 Tl 204,3835	Plomb 82 Pb 207,2 (1)	Bismuth 83 Bi 208,98040	Polonium 84 Po [209]	Astato 85 At [210]	Radon 86 Rn [222]	
7	Francium 87 Fr [223]	Radium 88 Ra [226]	Actinides 89-103	Rutherfordium 104 Rf [267]	Dubnium 105 Db [268]	Seaborgium 106 Sg [269]	Bohrium 107 Bh [270]	Hassium 108 Hs [271]	Méitnerium 109 Mt [278]	Darmstadtium 110 Ds [281]	Roentgenium 111 Rg [282]	Copernicium 112 Cn [285]	Nihonium 113 Nh [286]	Pfloumium 114 Fl [289]	Moscovium 115 Mc [289]	Livermorium 116 Lv [293]	Tennessee 117 Ts [294]	Oganesson 118 Og [294]	
			Lanthane 57 La 138,90547	Cérium 58 Ce 140,116 (1)	Prasodyme 59 Pr 140,90766	Néodyme 60 Nd 144,242 (3)	Prométhium 61 Pm [145]	Samarium 62 Sm 150,36 (2)	Europium 63 Eu 151,964 (1)	Gadolinium 64 Gd 157,25 (3)	Terbium 65 Tb 158,92535	Dysprosium 66 Dy 162,500 (1)	Holmium 67 Ho 164,93033	Erbium 68 Er 167,259 (3)	Thulium 69 Tm 168,93422	Ytterbium 70 Yb 173,045	Lutécium 71 Lu 174,9668		
			Akmanium 89 Ac [227]	Thorium 90 Th 232,0377	Protactinium 91 Pa [231,0368]	Uranium 92 U 238,02891	Néptunium 93 Np [237]	Plutonium 94 Pu [244]	Américium 95 Am [243]	Curium 96 Cm [247]	Berkélium 97 Bk [247]	Californium 98 Cf [251]	Einsteinium 99 Es [252]	Fermium 100 Fm [257]	Mendelevium 101 Md [258]	Nobelium 102 No [259]	Lawrencium 103 Lr [266]		

**Métaux**      **Non métaux**

Alcalins	Alcalino-terreux	Lanthanides	Actinides	Métaux de transition	Métaux pauvres	Métalloïdes	Autres non-métaux	Halogènes	Gaz nobles	Non classés	primordial	résintégration d'autres éléments	synthétique
----------	------------------	-------------	-----------	----------------------	----------------	-------------	-------------------	-----------	------------	-------------	------------	----------------------------------	-------------

Figure A.5 : Tableau périodique des matériaux chimiques.