

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

**UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF - M'SILA**

**FACULTE DE Technologie**  
**DEPARTEMENT Electronique**  
**N° :**



**FILIÈRE : Electronique**  
**OPTION : Microelectronique**

**Mémoire présenté pour l'obtention**  
**Du diplôme de Master Académique**

**Par:**

**DEMMANE Khaoula et DEKHANE Sara**

**THÈME**

**Etude par simulation numérique des propriétés  
physique des matériaux semi-conducteurs pour  
application photovoltaïque**

**Soutenu devant le jury composé de :**

Dr. BENNACER Hamza	Université M <sup>ed</sup> Boudiaf –M'sila	Président
Dr. HADJAB Moufdi	Université M <sup>ed</sup> Boudiaf –M'sila	Rapporteur
Dr. HADJLARBI Abderrahim	UDCMA-CRTI-Sétif	Co-Rapporteur
Dr. BOURAS Mounir	Université M <sup>ed</sup> Boudiaf –M'sila	Examineur

**Année universitaire : 2020 /2021**



## **Remerciement**

Je remercie ALLAH le tout-puissant de m'avoir donné le courage, la volonté et la patience de mener à terme ce présent travail.

Je tiens à exprimer mes vifs remerciements et témoigner ma profonde gratitude à *Dr. Moufdi HADJAB*, Maître de conférences à l'université de M'sila, qui m'a honoré de son encadrement et qui a accepté la lourde tâche de promoteur. Je lui exprime également ma profonde reconnaissance pour son dévouement d'avoir bien voulu me faire profiter pleinement de ses compétences scientifiques et encore de ses idées par les quelles il m'a orienté pour l'accomplissement de ce travail.

Je tiens également à remercier *Dr. BENNACER Hamza*, Maître de conférences à l'université de M'sila qui m'a fait l'honneur d'être le président du jury de mémoire. J'adresse aussi mes vifs remerciements à *Dr. BOURAS Mounir*, Maître de conférences, qui m'a fait l'honneur d'être les examinateurs de ce travail.

A tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à l'aboutissement de ce travail, nous aimerions leur dire merci.

Remerciements	i
Sommaire	ii
Liste des figures	iv
Liste des tableaux	vi
<b>Introduction générale</b>	1
<b>Chapitre I. Les composés chalcopyrites</b>	
I.1. Introduction	5
I.2. Historique sur les composés chalcopyrites	5
I.3. Définition du mot "chalcopyrite"	5
I.4. Les matériaux chalcopyrites	6
I.5. La structure chalcopyrite	8
I.6. Le ternaire XSnP <sub>2</sub> (X= Cd et Zn)	14
I.6.1. Les propriétés physico-chimiques	16
I.6.2. Les propriétés optiques	17
I.6.3. Applications des chalcopyrites	17
I.6.4. Les avantages des matériaux chalcopyrites	18
I.7. Conclusion	19
I.8. Références du Chapitre I	
<b>Chapitre II. Les cellules photovoltaïques</b>	
II.1. Introduction	23
II.2. Historique	23
II.3. Vocabulaire	24
II.4. Définition d'une cellule photovoltaïque	24
II.4.1. Principe de Fonctionnement d'une cellule solaire PV	26
II.4.2. Effet photovoltaïque	27
II.5. Différentes caractéristiques d'une cellule solaire	28
II.5.1. Modèle électriques d'une cellule photovoltaïque	28
II.5.2. Les différentes caractéristiques d'une cellule solaire	28
II.6. Couches minces	30
II.6.1. Définition	30
II.6.2. Bref historique de l'application des couches minces	30
II.6.3. Formation d'une couche mince	31
II.7. Les propriétés des couches minces	32
II.8. Applications des couches minces	33
II.8.1. Couches de protection contre la corrosion et l'usure	33
II.8.2. Couches minces dans les composants et dispositifs électroniques	33
II.8.3. Couches minces et optique	33
II.9. Oxydes transparents conducteurs	33
II.9.1. Propriétés électriques des TCOs	35
II.9.1.1. Largeur de la bande interdite des TCOs	35
II.9.1.2. Oxydes transparents conducteurs à l'état intrinsèque et dopés	35
II.9.2. Etude bibliographique sur le ZnO	36
II.9.3. Propriétés structurales de ZnO	36
II.10. Conclusion	38
II.11. Références du Chapitre II	39

**Chapitre III. Résultats et discussion**

III.1.	Introduction	42
III.2.	Présentation du logiciel de simulation AMPS-1D	42
	III.2.1 Définition du logiciel	42
	III.2.2. Les caractéristiques d'AMPS-1D	43
	III.2.3 Structure de cellules photovoltaïques à base de CdSnP <sub>2</sub>	44
III.3.	L'étude de l'effet de température (T) sur les performances de la cellule PV	46
III.4.	L'optimisation des différentes couches de structure	49
	III.4.1. L'effet de l'épaisseur de chaque couche sur la performance de la cellule PV	49
	III.4.2. Effet de l'épaisseur des couches en CdSnP <sub>2</sub> et ZnS	50
	III.4.3. L'effet de l'épaisseur de la couche en ZnS sur la performance de la cellule PV	51
III.5.	L'effet du dopage de chaque couche sur la performance de la cellule PV	52
	III.5.1. L'effet du dopage de la couche absorbante CdSnP <sub>2</sub>	53
	III.5.2 Effet du dopage de la couche en ZnS sur le rendement	54
	III.5.3. Calcul de l'efficacité quantique externe EQE	55
	III.5.4 Calcul des caractéristiques J-V et P-V	56
III.6.	Conclusion	58
III.7.	Références du chapitre III	59
	<b>Conclusion générale</b>	60

Figure I.1	Extrait de la classification périodique des éléments I-III-VI	6
Figure I.2	Diagramme de substitution Cationique	7
Figure I.3	Structure chalcopryrite	8
Figure I.4	La structure zincblende (à gauche), et la structure chalcopryrite (à droite)	9
Figure I.5	Illustration schématique de la formation de composés I-III-VI <sub>2</sub> et II-IV-V <sub>2</sub> à partir d'éléments du Groupe IV (Diagramme de substitution cationique)	10
Figure I.6	La représentation graphique de la première zone de Brillouin pour les deux structures (a) : zincblende et (b) : chalcopryrite	12
Figure I.7	Site anionique et le déplacement latéral u dans la structure chalcopryrite ABC <sub>2</sub>	13
Figure I.8	Les valeurs expérimentales du déplacement latéral u (le paramètre interne) versus les valeurs calculées selon pour quelques chalcopryrites	13
Figure I.9	L'énergie de gap fondamental versus le paramètre de maille pour quelques chalcopryrites de type II-IV-V <sub>2</sub>	14
Figure I.10	La structure cristalline de CdSnP <sub>2</sub>	14
Figure I.11	Les chalcopryrites II-IV-V <sub>2</sub> et leurs analogues binaires III-V	15
Figure I.12	La structure de bandes électroniques calculée pour le CdSSnP <sub>2</sub>	16
Figure I.13	Energies de bande pour différentes semi-conductrices chalcopryrites en fonction du paramètre cristallin 'a'	19
Figure II.1	Coupe schématique d'une cellule solaire	26
Figure II.2	Répartition spectrale du rayonnement solaire	27
Figure II.3	Schéma équivalent électrique de la cellule PV à une diode	28
Figure II.4	Les courbes I = f (V). P = f (V)	29
Figure II.5	Nombre de publications par année en relation avec les TCO SnO <sub>2</sub> et ZnO (base de données ISI Knowledge)	34
Figure II.6	Représentation des structures cristallines du ZnO: (a): hexagonal wurtzite, (b): cubique zinc blende et (c) :cubique rocksalt; (bleu : atome de zinc ; rouge : atome d'oxygène)	37
Figure II.7	La structure cristallographique de ZnO	38
Figure III.1	Fenêtre principale du logiciel AMPS-1D	42
Figure III.2	Fenêtre principale du logiciel wxAMPS-1D	43
Figure III.3	L'interface des conditions environnementales et des paramètres d'entrés et de convergence	44
Figure III.4	L'interface des propriétés physiques du matériau	44
Figure III.5	L'interface de résultats	45
Figure III.6	Structures schématiques de cellules solaires en couches minces basées sur CdSnP <sub>2</sub> ; avec une couche tampon de ZnS	46
Figure III.7	L'effet de température sur les paramètres électriques de la structure ZnO/ZnS/CdSnP <sub>2</sub>	47
Figure III.8	L'effet de la température sur les caractéristiques J-V de la structure ZnO/ZnS/CdSnP <sub>2</sub>	48

Figure III .9	L'effet de la température sur les caractéristiques P-V de la structure ZnO/ZnS/CdSnP <sub>2</sub>	49
Figure III .10	L'effet de la variation de l'épaisseur de la couche absorbante sur les performances de la cellule PV	51
Figure III .11	L'effet de la variation de l'épaisseur de la couche tampon sur les performances de la cellule PV	52
Figure III .12	L'effet de la variation des concentrations des dopants N <sub>A</sub> sur les performances de la cellule PV	54
Figure III .13	L'effet de la variation des concentrations des dopants N <sub>D</sub> sur les performances de la cellule PV	55
Figure III .14	Variation de QE en fonction de la longueur d'onde pour différentes valeurs de l'épaisseur de la couche absorbante	56
Figure III .15	Les caractéristiques électriques J-V et P-V, pour différentes épaisseurs d'absorbeur p-CdSnP <sub>2</sub>	57

Tableau I.1	La formule chimique des composés ternaires de type I-III-VI <sub>2</sub> et II-IV-V <sub>2</sub> et leurs analogues binaires.	8
Tableau I.2	Les positions et les coordonnées des 8 atomes de la maille tétragonale de la structure chalcopyrite	11
Tableau I.3	Paramètres de maille pour quelques chalcopyrites de type II-IV-V <sub>2</sub>	15
Tableau I.4	Positions des atomes de (II, IV, V) dans la maille chalcopyrite du (II-IV-V <sub>2</sub> )	15
Tableau I.5	Caractéristiques de quelques chalcopyrites ternaires	17
Tableau II. 1	Énergie de gap des principaux matériaux présents dans les capteurs solaires PV	25
Tableau II. 2	Valeurs énergétiques des photons issus du spectre solaire	28
Tableau II. 3	Largeurs des bandes interdites de quelques TCO	35
Tableau II. 4	Quelques propriétés générales de ZnO	37
Tableau III. 1	Les paramètres électriques en fonction de la variation de la température T	47
Tableau III. 2	Paramètres définis pour la simulation avec wxAMPS-1D	49
Tableau III. 3	L'effet de l'épaisseur de la couche CdSnP <sub>2</sub> dopée (P) sur les performances de la cellule PV	50
Tableau III. 4	L'effet de l'épaisseur de la couche ZnS sur les performances de la cellule PV	51
Tableau III. 5	L'effet de dopages de la couche CdSnP <sub>2</sub> sur les performances de la cellule PV	53
Tableau III. 6	L'effet de dopages de la couche ZnS dopé (n) sur les performances De la cellule PV	54
Tableau III. 7	Les résultats finals de l'optimisation par simulation	57

# Introduction générale

## ***Introduction générale***

Contenue des prévisions de l'explosion démographique prévisionnée pour les années à venir une forte demande d'énergie et à prévoir pour subvenir aux besoins future, or les énergies produite par les combustibles fossiles telle que le carbone le pétrole et le gaz naturel font partie des énergies polluantes et surtout non renouvelables qui ne peut pas approvisionner les besoins d'énergie pour les siècles à venir. donc pour pouvoir remédier à ce problème il va falloir d'envelopper les énergies renouvelables. Parmi les filières les plus avancées dans le domaine des énergies renouvelables la filière photovoltaïque qui consiste essentiellement à la conversion du rayonnement solaire en énergie électrique grâce à des cellules PVs à base de semi-conducteurs s'avère très prometteuse mais avec des limitations concernant les prix élevés comparés aux sources conventionnelles. Les recherches les plus avancées à ce jour se concentrent sur deux axes essentielles. L'axe principal se concentre sur l'amélioration du rendement des cellules photovoltaïques afin de profiter au maximum des rayonnements du spectre solaire. le deuxième axe a pour but d'innover des procédés et matériaux nouveaux en vue de la fabrication de cellules photovoltaïques moins chères que possible. Une estimation de 2012 a constaté que plus de 90 % de part de marché photovoltaïque est dominé par des technologies principalement constituées de silicium sous forme de plaquette naturelle monocristallin ou polycristallin comme matériau absorbant avec un rendement record de 26.6%. Afin d'obtenir des résultats de rendement meilleur les ternaires chalcopyrites semblent être une alternative prometteuse puisque ils sont des matériaux à bande interdite directe et un coefficient d'absorption plus important. Par conséquent, les composés les plus communs pour faire des cellules solaires en multi-jonction sont les chalcopyrites de type II-IV-V<sub>2</sub>. Dans ce contexte, de grands efforts sont consacrés récemment, théoriquement et expérimentalement pour bien exploiter ces matériaux comme des couches absorbantes en cellules photovoltaïques. Notre but dans ce travail, est l'étude par simulation d'une cellule solaire à base de CdSnP<sub>2</sub> avec le simulateur wxAMPS-1D (Analysis of Microelectronic and Photonic Structures) dans les conditions standard (T=25°C et sous illumination de AM 1.5) et fait l'optimisation de quelques paramètres physiques de chaque couche tel que l'épaisseur et le dopage pour l'amélioration du rendement. En outre, l'étude de l'effet de la température sur les paramètres de sortie de la cellule comme la densité de courant de court-circuit (J<sub>sc</sub>), la tension de circuit ouvert (V<sub>co</sub>), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) est considérée.

Notre mémoire regroupe trois chapitres plus une introduction et conclusion générales. Dans le premier chapitre, nous avons présenté des généralités sur les matériaux ternaires chalcopyrite et notamment le CdSnP<sub>2</sub> on revu leurs différentes propriétés électriques,

## ***Introduction générale***

optiques et électroniques indispensables pour le lancement de la simulation. Dans le deuxième chapitre, nous avons présenté brièvement le principe de fonctionnement des cellules photovoltaïques et un rappel sur les différentes générations des cellules photovoltaïques réalisées jusqu'à nos jours. Dans le troisième chapitre, nous avons présenté les résultats de la simulation de structure proposée soit à hétérojonction ZnO/ZnS/CdSnP<sub>2</sub> ou bien, la structure Tandem ZnO (n)- ZnS (n) CdSnP<sub>2</sub> (p) avec l'outil de simulation wxAMPS-1D. Afin, d'optimiser le rendement électrique de cette structure, on a déterminé et discuté l'influence du dopage, l'épaisseur et la température sur les caractéristiques électriques de cellule.

Chapitre I.

# Les composés chalcopyrites

## I.1. Introduction

Ces dernières années, plusieurs recherches sont orientées vers l'utilisation des matériaux ternaires du groupe I-III-VI<sub>2</sub> de type chalcopyrite, sont des semi-conducteurs qui se cristallisent dans la structure chalcopyrite, ces matériaux richissent de leurs propriétés physiques et chimiques. Leurs basse symétrie, grande stabilité, grand coefficient optique et leurs bande interdite directe confère, ces composés ont utilisant dans les applications technologiques (les cellules solaires, diodes électroluminescentes et les photo-détecteurs) [1].

## I.2. Historique sur les composés chalcopyrites

Au début de 1969, la première interaction non linéaire mettant en jeu un cristal à structure chalcopyrite était réalisée par Goryunova et ses collaborateurs [2]. Ils ont observé la génération de second harmonique par réflexion sur plusieurs composés ternaires. Mais les rayonnements du laser à rubis utilisé et de son harmonique étant très fortement absorbées par les semiconducteurs qu'ils étudient, les résultats de leurs mesures ne donnent donc pas des renseignements utiles dans les plages de transparence. Ce ne fut qu'après la démonstration expérimentale des possibilités de réaliser des interactions paramétriques à l'accord de phase que l'intérêt envers cette famille fut réellement éveillé. La possibilité de réaliser un accord de phase sur ces cristaux fut démontrée presque simultanément au cours de l'année 1970-1971 dans trois laboratoires sur trois cristaux différents : AgGaS<sub>2</sub> [3] à Bagnoux (France), ZnGeP<sub>2</sub> [4] à Holmdel (U.S.A) et CdGeAs<sub>2</sub> [5] à l'Université de Stanford (U.S.A).

Au cours de l'année 1971-1972, Boyd et al [6-9] ont mené une étude approfondie des propriétés optiques linéaires et non linéaires sur plus de dix cristaux à structure chalcopyrite. Ces travaux aboutirent à une bonne connaissance des plages d'accord de phase des principaux Composés de la famille. La première théorie des constantes diélectriques linéaires et des susceptibilités du deuxième ordre des composés ternaires était proposée par Chemla [10, 11], ainsi qu'une explication de la formule générale des composés de formule générale II-IV-V<sub>2</sub> [11].

## I.3. Définition du mot "chalcopyrite"

Le mot "chalcopyrite" ou bien le "cuivre jaune" est lancé à l'origine sur l'espèce et l'opaque minérale de formule {CuFeS<sub>2</sub>- sulfure de cuivre et de fer} (Figure I.1) composée de sulfure double (35 %), de cuivre (34.5 %) et de fer (30.5 %), décrite par Henckel en 1725. Le nom chalcopyrite est inspiré du grec (chalkos) pour le cuivre et de pyrite. [12, 13]

IB	IIIA	VIA
29 63.546 <b>Cu</b> CUIVRE	5 10.811 <b>B</b> BORE	8 15.999 <b>O</b> OXYGÈNE
47 107.87 <b>Ag</b> ARGENT	13 26.982 <b>Al</b> ALUMINIUM	16 32.065 <b>S</b> SOUFRE
79 196.97 <b>Au</b> OR	31 69.723 <b>Ga</b> GALLIUM	34 78.96 <b>Se</b> SÉLÉNIUM
111 (280) <b>Rg</b> ROENTGENIUM	49 114.82 <b>In</b> INDIUM	52 127.60 <b>Te</b> TELLURE

Figure I.1. Extrait de la classification périodique des éléments I-III-VI

#### I.4. Les matériaux chalcopyrites

A  $T = 300^\circ \text{K}$ , les composés de type I-III-VI<sub>2</sub> avec I, III, et VI représentant des éléments dans les colonnes du tableau périodique) avec I = Cu, Ag, Au - III = In, Ga, Al et VI = Se, S, Te, se cristallisent dans la phase chalcopyrite. En général les matériaux chalcopyrite ABX<sub>2</sub> sont : CuInSe<sub>2</sub>, CuInS<sub>2</sub>, CuInTe<sub>2</sub>, CuGaSe<sub>2</sub>, ... Les composés chalcopyrite les plus importants pour les applications photovoltaïques sont : CuInSe<sub>2</sub>, CuInS<sub>2</sub> et CuGaSe<sub>2</sub> et CuGaSe<sub>2</sub>, ces matériaux composés offrent un coefficient d'absorption très grand de l'ordre  $10^5 \text{ cm}^{-1}$ . Dans certaines conditions expérimentales, des nombreux auteurs ont synthétisés ces matériaux dans la structure sphalérite (dite aussi zinc blende). Ces composés étant homologues aux éléments de la colonne VI, cristallisant dans la structure diamant, la chalcopyrite et la sphalérite sont des généralisations de cette structure par différenciation des atomes [14], cette relation peut être représentée par le digramme ci-dessous :

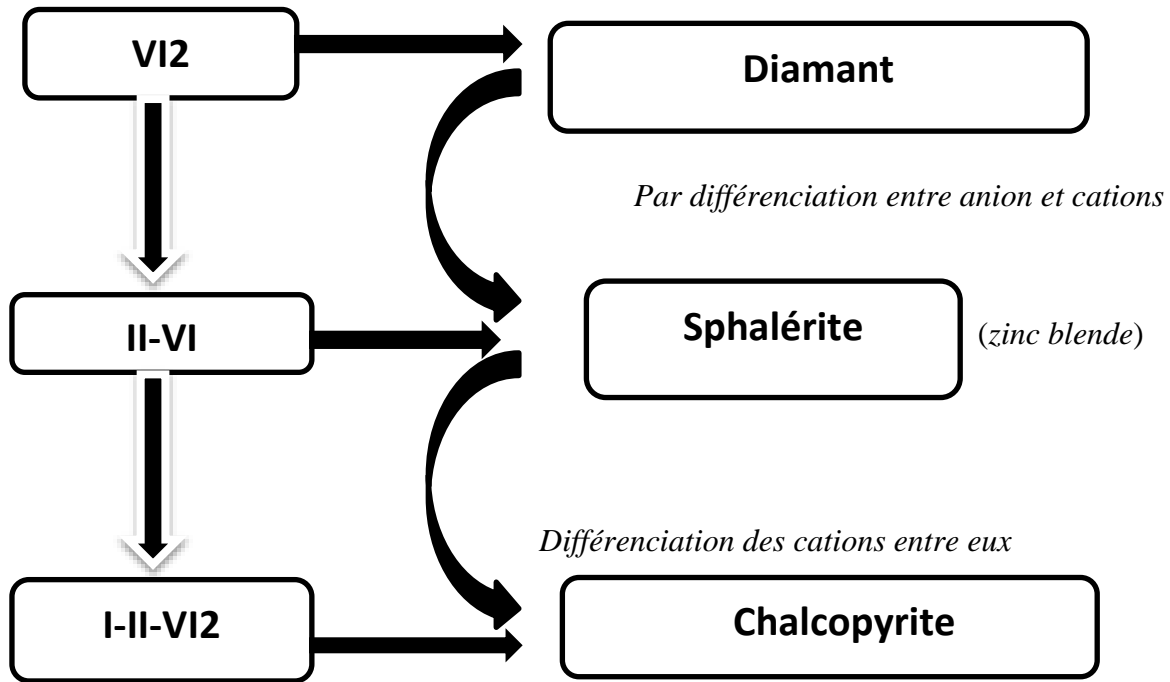


Figure I.2. Diagramme de substitution Cationique [14]

Les composés ternaires de type I-III-VI<sub>2</sub> stabilisent dans la structure chalcopyrite dans une température ambiante, cette structure appartient au système quadratique présentée sur la figure I.3. Dans ce cas, les cations ont une structure bien ordonnée, quand à l'atome de (Se, S, Te), il occupe un site tétraédrique et lié à deux atomes de cuivre et deux atomes d'indium ou galium.

Les groupes d'espace de la chalcopyrite sont [15] :

- ✓ Chalcopyrite CuFeS<sub>2</sub> I 42d 4 2m
- ✓ Eskebornite CuFeSe<sub>2</sub> I 42d 4 2m
- ✓ Gallite CuGaS<sub>2</sub> I 42d 4 2m
- ✓ Roquesite CuInS<sub>2</sub> I 42d 4 2m
- ✓ Lenaite AgFeS<sub>2</sub> P 42mc 4mm
- ✓ Laforetite AgInS<sub>2</sub> I 42d 4 2m

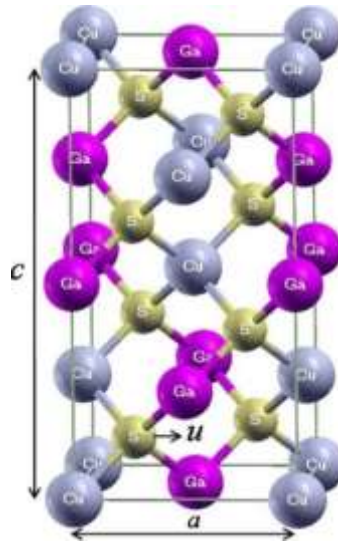


Figure I.3. Structure chalcopyrite [15]

### I.5. La structure chalcopyrite

Tout récemment, une grande attention a été accordée à l'étude des propriétés électroniques et optiques des composés ternaires de la formule chimique :  $A^{N-1}B^{N+1}C_2^{\delta-N}$  ( $N=3, 2$ ). Théoriquement, l'étude des propriétés électroniques et optiques de ces composés est une extension logique à l'étude de leurs plus proches analogues les semi-conducteurs Zinblende de type  $B^N C^{\delta-N}$  ( $N=3, 2$ ) (tableau I.1). Les composés  $A^{N-1}B^{N+1}C_2^{\delta-N}$  ont de nombreuses propriétés physiques intéressantes qui promettent d'être utile pour les applications de la technologie des semi-conducteurs [16].

Tableau I.1. La formule chimique des composés ternaires de type  $I-III-VI_2$  et  $II-IV-V_2$  et leurs analogues binaires.

	Le composé $A^{N-1}B^{N+1}C_2^{\delta-N}$	L'analogue binaire $B^N C^{\delta-N}$
N = 2	$A^I B^{III} C_2^{VI}$ (I-III- $VI_2$ )	$B^{II} C^{VI}$ (II-VI)
N = 3	$A^{II} B^{IV} C_2^V$ (II-IV- $V_2$ )	$B^{III} C^V$ (III-V)

Les composés chalcopyrites  $ABC_2$  de la structure ( $I-III-VI_2$  avec des anions de type *chalcogenide*) et ( $II-IV-V_2$  avec des anions de type *pnictide*) font toujours l'objet de nombreux

travaux. Ils constituent une extension naturelle des composés de structure Zinblende (*II-VI*) et (*III-V*) dont ils découlent cristallographiquement (figure.I.1). Ils ont presque le même arrangement des atomes anions mais différent dans l'ordre de distribution des atomes cations (A et B) qui font que la cellule unité tétragonale a un *axe-c* avoisinant le double de l'*axe-a* de la cellule unité zinblende. On peut définir un analogue binaire à chaque composé ternaire  $ABC_2$  en prenant le cation de la colonne située entre les atomes A et B dans le tableau périodique [16,17]. C'est le cas du  $ZnS$  qui est l'analogue binaire de  $CuGaS_2$  ou bien le cas du  $GaP$  qui est l'analogue binaire de  $ZnGeP_2$  (figure I.1).

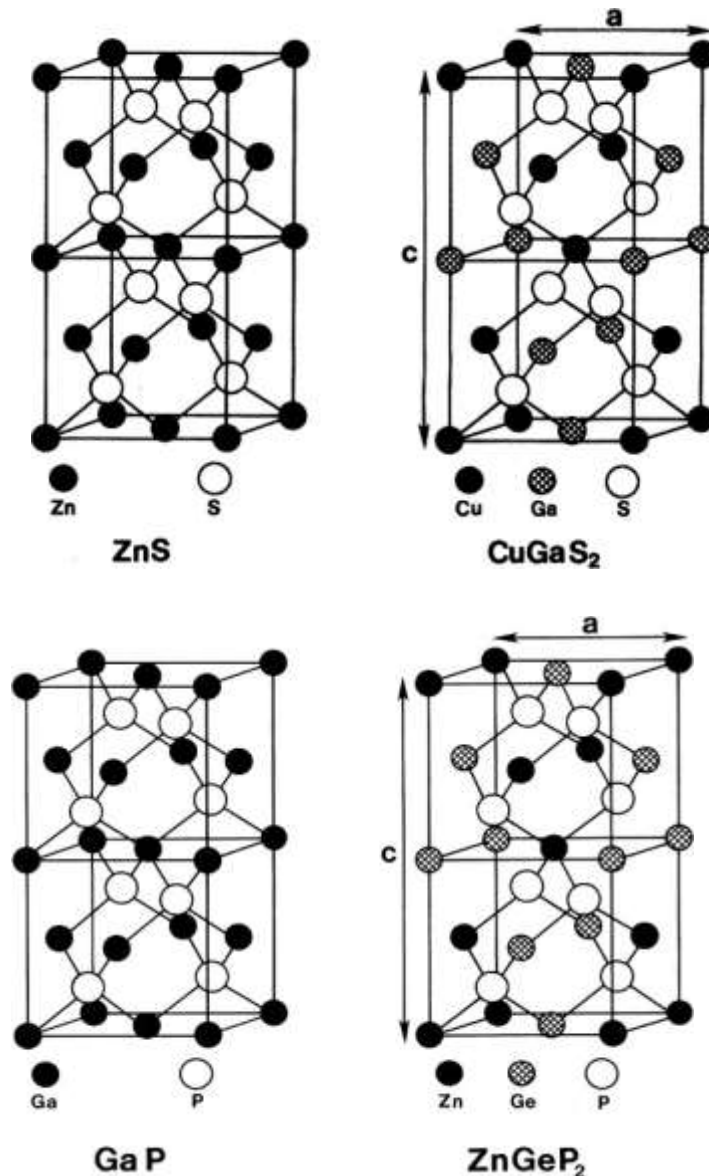


Figure I.4. La structure zinblende (à gauche), et la structure chalcopyrite (à droite) [18-20].

Donc, ces matériaux de structure à empilement tétraédrique peuvent être considérés comme des dérivés polycationiques d'un composé monoatomique de la quatrième colonne du tableau

périodique de *Mendeleïev*. La substitution cationique des composés (*II-VI*) et (*III-V*) donne lieu à des familles de composés qui possèdent à nouveau une même structure tétraédrique : la structure chalcopyrite. Cette relation peut être représentée par un diagramme de substitution cationique [16,21].

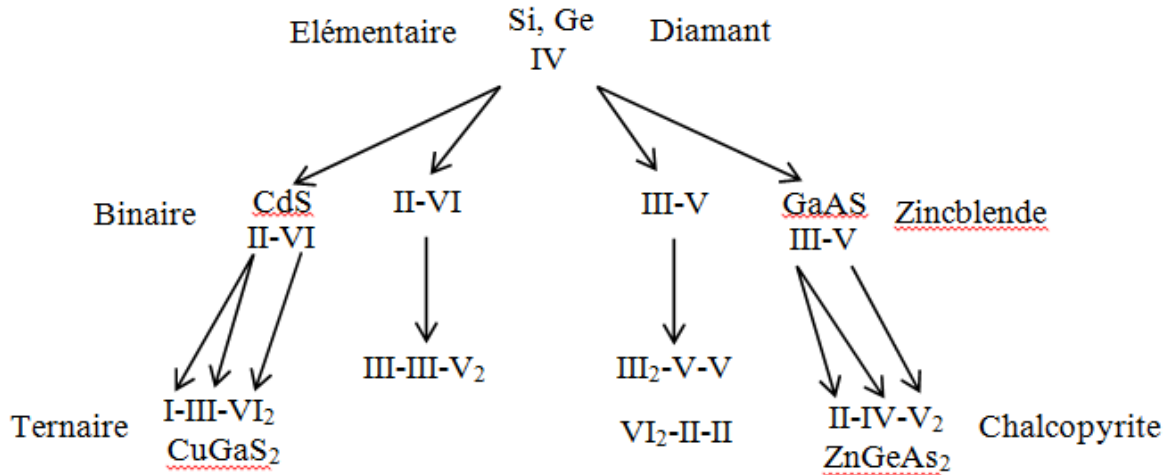


Figure.I.5. Illustration schématique de la formation de composés I-III-VI<sub>2</sub> et II-IV-V<sub>2</sub> à partir d'éléments du Groupe IV (Diagramme de substitution cationique) [22, 23]

Les chalcopyrites ternaires  $ABC_2$  cristallisent dans la structure tétragonale avec un groupe d'espace de type  $I\bar{4}2d$  ( $D_{2d}^{12}$ ) (8 atomes par maille unitaire primitive) qui constitue une superstructure du réseau *Zincblende*  $F43m$  (2 atomes par maille unitaire) [22]. Il est clair de voir que cette structure dérive de la structure cristalline *zincblende* par dédoublement de sa cellule cubique le long de l'axe  $z$  (qui devient par la même occasion l'axe  $c$  de la structure chalcopyrite) [24]. Comparée à la structure *zincblende*, la structure chalcopyrite est différente en ayant deux types d'atomes cations. En effet, dans le cristal chalcopyrite les deux cations ne sont pas aléatoirement distribués, mais ils sont arrangés périodiquement [24]. Les chalcopyrites sont des structures tétragonale (de coordination 4) où chaque atome est associé à quatre atomes proches voisins formant un tétraèdre plus ou moins régulier. Chaque anion (C) est lié à deux cations (A) et deux cations (B) alors que chaque cation est lié à quatre anions en formant le tétraèdre sus-indiqué [25,26].

La structure chalcopyrite est décrite dans le groupe d'espace  $I\bar{4}2d$  avec les positions atomiques suivantes :

Tableau I.2. Les positions et les coordonnées des 8 atomes de la maille tétragonale de la structure chalcopyrite en fonction de  $a$ ,  $c$  et  $u$  rapporté par Zunger [26]. Les vecteurs unitaires du réseau sont :  $a_1 = a (1, 0, 0)$  ;  $a_2 = a (0, 1, 0)$  et  $a_3 = a (1/2, 1/2, c/2a)$  avec le volume de la maille est  $(V=a^2.c/2)$  [26].

Atomes	Les coordonnées (x, y, z)
A1	0, 0, 0
A2	0, a/2, c/4
B1	a/2, a/2, 0
B2	a/2, 0, c/4
C1	a (1/4+u), a/4, c/8
C2	a (3/4-u), 3a/4, c/8
C3	a/4, a (3/4+u), 3c/8
C4	3a/4, a (1/4-u), 3c/8

Comme la cellule primitive d'un cristal de chalcopyrite est quatre fois plus grande que la maille élémentaire d'un cristal de zincblende comprimé le long de l'axe z, la zone de Brillouin de zincblende est quatre fois plus grande que celle de l'analogue de la chalcopyrite (figure I.3) [27].

Les cations sont considérés comme répartis de manière aléatoire parmi la position de cations dans l'analogue Zincblende. Ensuite, le composé possède la structure de zincblende, l'un des deux sites de la maille primitive est occupé par l'anion et l'autre par la moyenne des deux cations  $\left(\frac{A^2+B^2}{2}\right)$  Il est seulement de l'ordre des deux cations et leurs différents potentiels que réduit la zone de Brillouin [27].

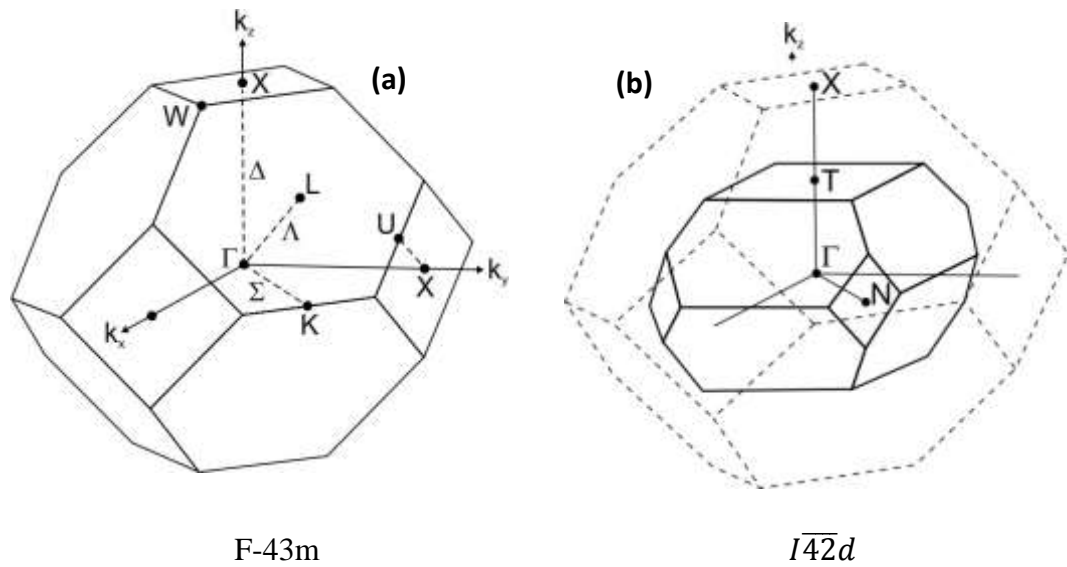


Figure I.6 : La représentation graphique de la première zone de Brillouin pour les deux structures (a) : zincblende et (b) : chalcopyrite [28].

Généralement, un ternaire chalcopyrite, est composé de mélange entre deux structures Zincblende et introduit un changement du groupe de symétrie du (F-43m) au ( $I\bar{4}2d$ ) caractérisant ainsi une structure quadratique chalcopyrite pour ces types de cristaux, le paramètre de maille  $c$  devrait être le double du paramètre  $a$  [22], or les chalcopyrites présentent, de par l'alternance des cations, des modifications structurales qui sont : un déplacement anionique  $u$  (aussi appelé le paramètre interne) et une compression quadratique  $c/a$  [16]. Le paramètre interne  $u$  n'influe que sur les distances entre le premier voisin ( $d_{AX}$  et  $d_{BX}$ ). De plus, en raison des différences de rayon entre les deux cations, le réseau est distordu avec une hauteur de cellule unie et légèrement inférieure au double de la base. Le cristal entier se trouve comprimé le long de l'axe cristallographique  $c$ . Pour une chalcopyrite idéale,  $u = 1/4$ ,  $c/a = 2$ ,  $\tau = 0$  et  $\eta = 1$  [22]. Les deux atomes  $A$  et  $B$  sont coordonnés par un tétraèdre d'atomes  $X$ . Les deux distances les plus importantes  $d_{AX}$  et  $d_{BX}$  sont liées à la longueur de cellule et l'atome  $X$  par sa position interne libre par la relation [16]:

$$d_{AX} = \sqrt{a^2 u^2 + \frac{4a^2 + c^2}{64}} \quad (I.1)$$

$$d_{EX} = \sqrt{a^2 (u^2 - 1/2)^2 + \frac{4a^2 + c^2}{64}} \quad (I.2)$$

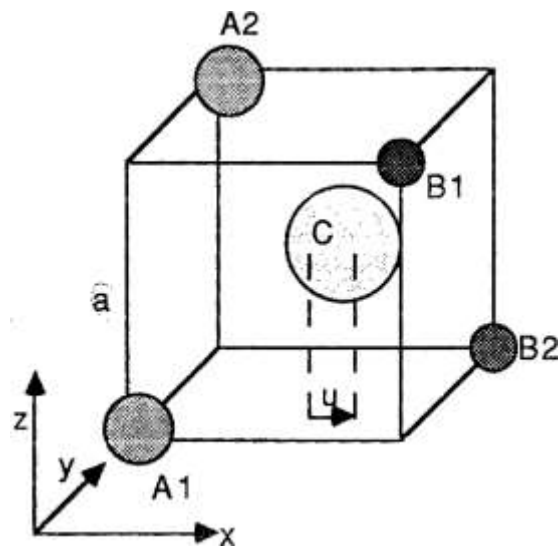


Figure I.7. Site anionique et le déplacement latéral  $u$  dans la structure chalcopyrite  $ABC_2$  [21 25].

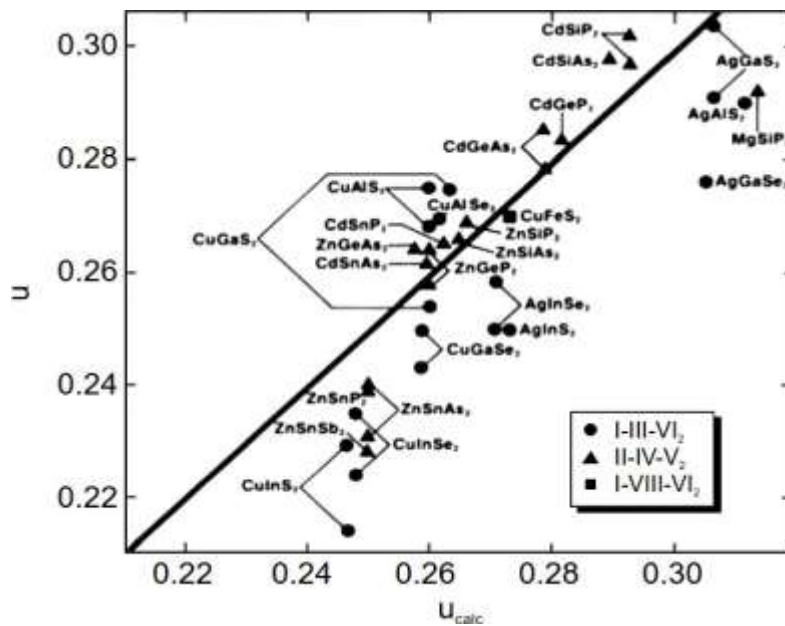


Figure I.8. Les valeurs expérimentales du déplacement latéral  $u$  (le paramètre interne) versus les valeurs calculées selon [19] pour quelques chalcopyrites [28].

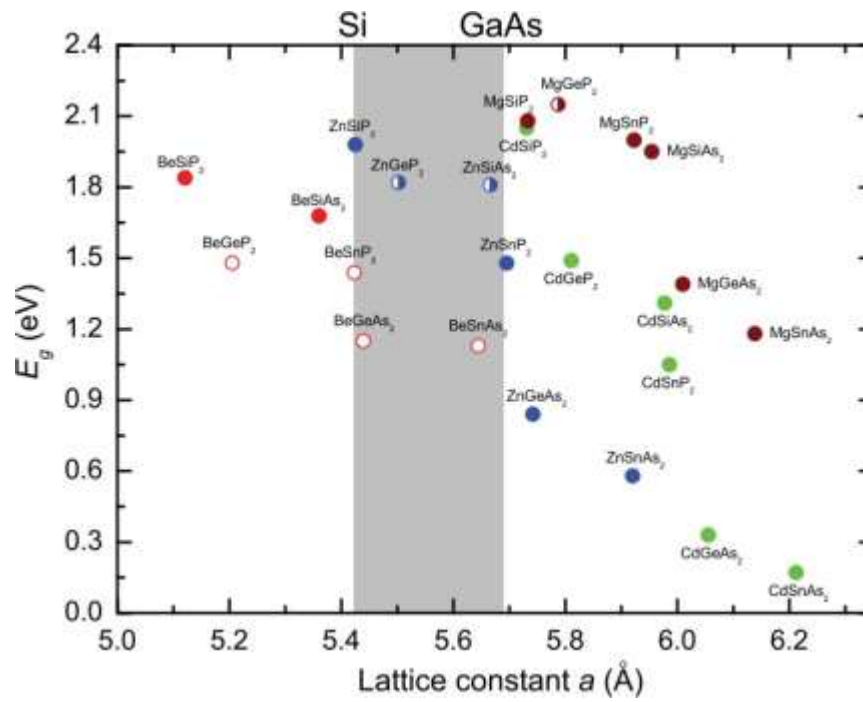


Figure I.9. L'énergie de gap fondamental versus le paramètre de maille pour quelques chalcopyrites de type II-IV-V<sub>2</sub> [29].

### I.6. Le ternaire XSnP<sub>2</sub> (X= Cd et Zn)

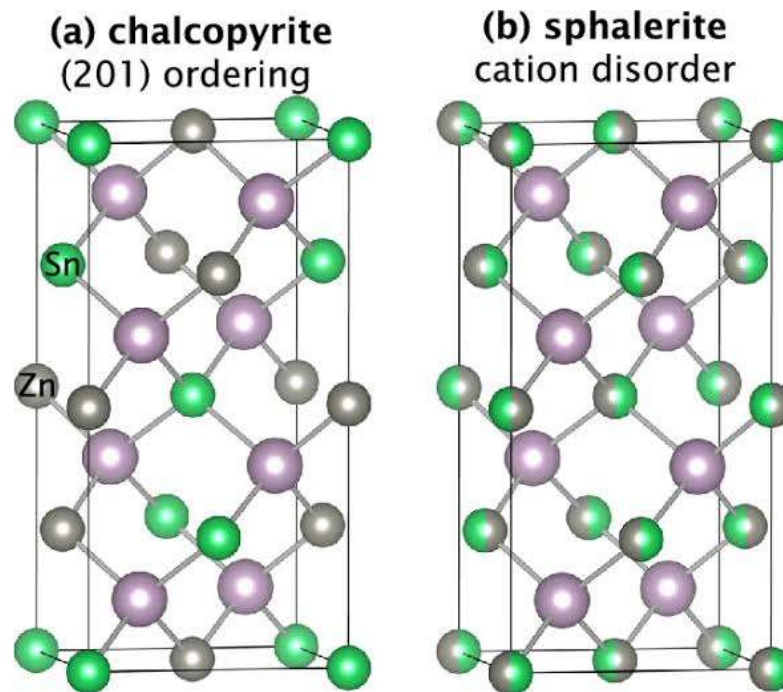


Figure I.10. La structure cristalline de CdSnP<sub>2</sub>

La figure I .10 illustre la structure christalline du ternaire ZnSnP<sub>2</sub> [30], qui est

tetragonale ( $a=b \neq c$ ), ( $c \approx 2a$ ), ( $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ ).

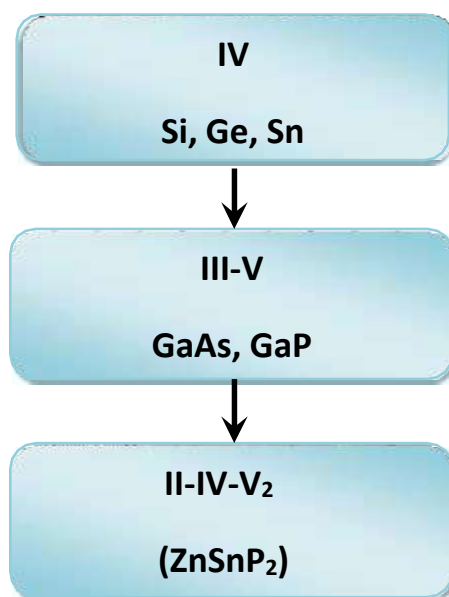


Figure I.11. Les chalcopyrites II-IV-V<sub>2</sub> et leurs analogues binaires III-V [31].

Dans le tableau I.3. Nous présentons quelques valeurs pour des paramètres de maille des quelques chalcopyrites.

Tableau I.3. Paramètres de maille pour quelques chalcopyrites de type II-IV-V<sub>2</sub>

Composé	a=b(Å)	c(Å)	c/a	u
MgSiP <sub>2</sub>	5.700	9.408	1.650	0.288
MgSiSb <sub>2</sub>	5.954 (GGA)	10.800	1.814	0.286
	5.885 (LDA)	10.569	1.796	0.285
BeSiP <sub>2</sub>	5.100	10.173	1.994	0.234
BeGeAs <sub>2</sub>	5.370	10.873	2.025	0.2177
BeSnP <sub>2</sub>	5.380	10.816	2.010	0.1935

Dans le tableau (I.3), nous présentons les coordonnées des différents atomes (II, IV, V) dans la maille élémentaire de type (II-IV-V<sub>2</sub>) à structure chalcopyrite [32, 33].

Tableau I.4. Positions des atomes de (II, IV, V) dans la maille chalcopyrite du (II-IV-V<sub>2</sub>)

II	(0, 0, 0)	(0, 1/2, 1/4)
IV	(1/2, 1/2, 0) (0, 0, 1/2)	(1/2, 0, 1/4) (0, 1/2, 3/4)
V	(u, 1/4, 1/8) (-1/4, u, -1/8)	(u, -1/4, 1/8) (1/4, -u, -1/8)

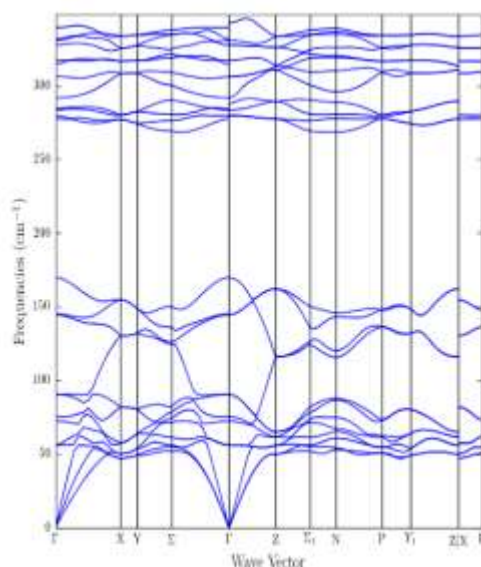
Avec :  $u$  le déplacement de l'anion de sa position idéale dans une structure chalcopyrite s'écrit sous la forme :

$$u = 1/4 + (\alpha/a^2) \quad (\text{I-3})$$

$\alpha$ : est l'écart des longueurs de liaisons [34].

### I.6.1. Les propriétés physico-chimiques

Les propriétés physico chimique d'un matériau sont des facteurs indispensables pour le choix d'une application technologique. C'est le cas pour les cellules photovoltaïques ou les propriétés optoélectroniques des matériaux le facteur le plus important. Dans ce qui suit-on vas évoquer quelques propriétés optoélectroniques du CdSnP<sub>2</sub> tels que la structure de bande électronique, La partie imaginaire et la partie réelle de la fonction diélectrique pour le CdSnP<sub>2</sub>, le coefficient l'absorption  $\alpha(\omega)$ , l'indice de réfraction  $n(\omega)$  et l'indice de réflectivité  $R(\omega)$ .

Figure I.12. La structure de bandes électronique calculée pour le CdSSnP<sub>2</sub>.

### I.6.2. Les propriétés optiques

Les différentes façons dont la lumière interagit avec la matière sont l'absorption, la transmission, la réflexion, l'indice de réfraction, la diffusion ou l'émission. Ces propriétés dépendent de l'énergie. L'étude des propriétés optiques des solides est un outil puissant pour comprendre les propriétés électroniques des matériaux car la dépendance énergétique des propriétés optiques est liée à la structure de la bande. Par conséquent, des informations sur les valeurs propres d'énergie et la fonction propre d'énergie sont nécessaires pour calculer les propriétés optiques dépendantes de la fréquence, et l'énergie. La propriété optique de quelques matériaux chalcopyrite de type II-IV-V<sub>2</sub> sont comparées dans le tableau :

Tableau I.5. Caractéristiques de quelques chalcopyrites ternaires [35-38].

Composé	c/2a	E <sub>g</sub> (eV)	Paramètres optiques statiques		
ZnSiP <sub>2</sub>	0.966(LDA)	1.881(mBJ)	8.321(x)- 8.308(z)	2.885 (x)- 2.882 (z)	0.235(x)- 0.235(z)
ZnGeP <sub>2</sub>	0.980(LDA)	1.742(mBJ)	8.530(x)- 8.550(z)	5.921(x)- 5.925(z)	0.240(x)- 5.921(z)
MgSiP <sub>2</sub>	0.860	2.00 (mBJ)	-	2.826	0.228
MgSiSb <sub>2</sub>	0.907(GGA)	0.826(GGA)	-	3.783(x)-	0.339(x)-
	0.898(LDA)	0.823(LDA)		3.849(z)	0.345(z)
MgSiP <sub>2</sub>	0.893(GGA)	1.20(GGA)	-	3.386(x)-	0.296(x) -
	0.889(LDA)	1.80(mBJ)		3.373(z)	0.295(z)

### I.6.3. Applications des chalcopyrites

Les principaux avantages de ce matériau semi-conducteur sous sa structure chalcopyrite sont les suivants [39-41]:

- ✓ Son gap direct avec une valeur de 1.04 eV, cette énergie permet de d'absorber une large gamme du spectre solaire.
- ✓ Son coefficient d'absorption qui est très élevé dans le domaine du visible et du proche Infrarouge, une couche de CuInSe<sub>2</sub> de 1µm permet l'absorption de 99% des photons qui arrivent à la surface de la cellule, pour atteindre ce taux d'absorption dans

le cas des cellules à base de silicium il faut une épaisseur d'environ 350  $\mu\text{m}$ .

- ✓ La possibilité de changement de type de conduction ( $n$  ou  $p$ ) de ce semi-conducteur et de son gap sans passer par le dopage par des atomes étrangers.
- ✓ Bonne accommodation du réseau avec les couches tampons telles que : CdS et CdZnS et permettant de réduire les états d'interface.
- ✓ Sa stabilité électrique et thermique excellente sous les conditions d'opérations.
- ✓ Excellente résistance aux irradiations.
- ✓ La possibilité d'élaboration de ce semi-conducteur par plusieurs techniques et sur différents types de substrat.
- ✓ Il n'est pas toxique comme certains semi-conducteurs III-V.

#### I.6.4. Les avantages des matériaux chalcopyrites

Les principaux avantages de ces matériaux semi-conducteurs ou ses structures chalcopyrites ont les suivants [42,45]:

- ✓ fabriqués en couches minces, soit de type p soit de type n, ce qui permet une production à faible coût d'une variété de composants en homo, et hétérojonction.
- ✓ les composé  $\text{CuInSe}_2$ ,  $\text{CuInS}_2$  et  $\text{CuGaSe}_2$  et  $\text{CuGaSe}_2$  avec une grande absorption.
- ✓ Ils sont Sont des semi-conducteurs à gap direct.
- ✓ La possibilité de changement de type de conduction ( $n$  ou  $p$ ) de ces semi-conducteurs et de son gap sans passer par le dopage par des atomes étrangers
- ✓ Leurs paramètres de maille, et l'affinité électronique sont en bon coordinance avec ceux du CdS, qui est un semi-conducteur à grand gap direct, et qui a déjà prouvé son efficacité dans les cellules solaires.

On peut dire que l'importance de ces matériaux réside dans leurs applications optoélectroniques, en particulier dans le visible, et l'infrarouge par l'intermédiaire des cellules solaires, les diodes électroluminescentes, ou les détecteurs infrarouges.

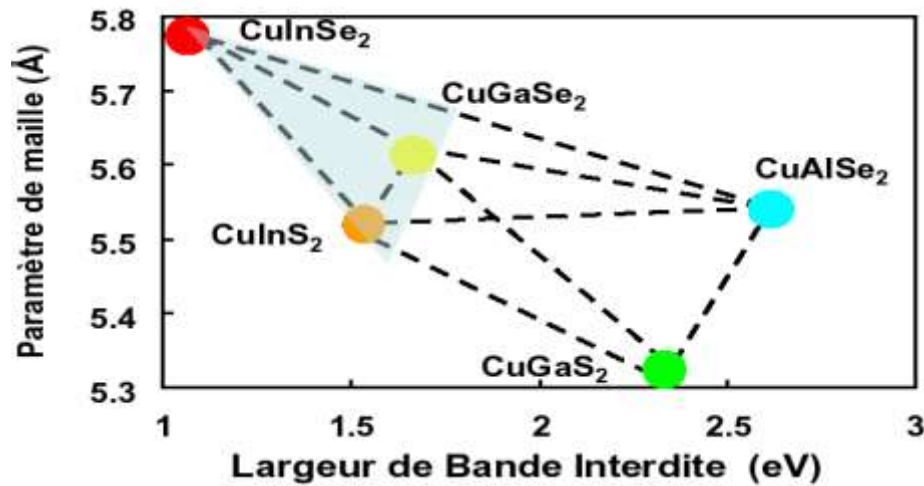


Figure I.13. Energies de bande pour différentes semi-conductrices chalcopyrites en fonction du paramètre cristallin 'a' [44]

## I.7. Conclusion

Les chalcopyrites sont des matériaux prometteurs dans plusieurs domaines et applications et surtout en cellule photovoltaïque, soit dans les cellules solaires à base des couches minces (*Thin film Solar cells*), ou bien comme des matériaux absorbants dans des cellules solaires multijonction (*MJ solar cells*) concernant la famille de notre cas..

Dans cette étude on va faire une synthèse bibliographique des propriétés structurales et optoélectroniques des ternaires chalcopyrites de la forme  $XSnP_2$  ou ( $X=Cd$  et  $Zn$ ) afin d'exploiter ces données dans la conception, la simulation et la modélisation numérique des cellules photovoltaïques en couches minces.

## I.8. Les références du Chapitre I

- [1] L. L. Kazmerski, *Nuovo Cimento*, D2, 2013 (1983).
- [2] N. A. Goryunova et al. *Phys. semiconductors* 2 (1969) 1271-1274.
- [3] D. S. Chemla, P. J. Kupecek, D. S. Robertson and H. C. Smith, *Optics Communic.*, 3 (1971) 29-31.
- [4] G. D. Boyd, E. Buehler and F. G. Storz, *Appl. Phys. Letters*. 18 (1971) 301-304.
- [5] R. L. Byer, H. Kildal and R.S. Feigelson, *Appl. Phys. Letters*. 19 (1971) 237-240
- [6] G. D. Boyd, E. Buehler and W. B. Gandrud, *Appl. Phys. Letters*. 19 (1971) 446-448.
- [7] G. D. Boyd, H. Kasper and J. H. Mcfee, *I.E.E.E. J. Q.E.* 7 (1971) 563-573.
- [8] G. D. Boyd, E. Buehler, F. G. Storz and J. H. Wernick, *I.E.E.E. J. Q.E.* 8 (1972) 419-426.
- [9] G. D. Boyd, H. Kasper and J. H. Mcfee and F. G. Storz, *I.E.E.E. J. Q.E.* 8 (1972) 900-908.
- [10] D. S. Chemla *Phys. Rev. Lett.* 26 (1971) 1441-1444.
- [11] D. S. Chemla *Ann. Telecommunic* 27 (1972) 311-498.
- [12] D. L. Jones, thèse de Doctorat, Université de British Columbia, Vancouver, Canada, 1974.
- [13] M. Manutchehr-Dancu, *Dictionary of Gems and Gemology*, 2009.
- [14] M. Yassine Bouaichaoui, 2017 Etude des propriétés fondamentales des matériaux chalcopyrites. Application à la conversion photovoltaïque
- [15] M. Yassine Bouaichaoui, 2017 Etude des propriétés fondamentales des matériaux chalcopyrites. Application à la conversion photovoltaïque
- [16] Ouahrani Tarik, "Calcul des propriétés structurales, thermiques et optiques des composés chalcopyrites par la méthode FP-(L) APW", Thèse de doctorat en physique, Université de Tlemcen, 2011.
- [17] M. Bensalem Elmahdi Naceur, Kahili Mohamed Mostapha, 2020 Contribution à l'étude des cellules Photovoltaïque hétérostructure et tandem Sous AMPS-1D
- [18] Wanxiang Feng, Jun Ding, Di Xiao, and Yugui Yao, *Phys. Rev. Lett.* 106, 016402 – 2011
- [19] J. E. Jaffe and Alex Zunger, *Physical Review B*, Vol 29, N° 4, p1882-1906, (1984).
- [20] J. E. Jaffe and Alex Zunger, *Physical Review B*, Vol 30, N° 2 – p741, (1984).
- [21] Olivier Brisson, "Elaboration et caractérisation de monocristaux de  $AgGaX_2$  ( $X = S, Se$ ) pour l'optique non-linéaire dans l'infrarouge. Approche par simulation numérique de l'hydrodynamique dans la phase fluide", Thèse de Doctorat, Université Bordeaux I, France, (1995).
- [22] Wernicke et al, "Ternary Chalcopyrite Semiconductors: Growth, Electronic Properties, and Applications", (livre), Pergamon press, 1975.
- [23] Siebentritt. S, Rau. U, "Wide-Gap chalcopyrite", (Livre), Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2006).
- [24] Chahed Abbes, "Etude Ab-initio des propriétés structurales, électroniques et optiques des semi-conducteurs chalcopyrites  $AgXY_2$  ( $X=Al, Ga, In$  et  $Y=S, Se, Te$ ), thèse de doctorat d'état en physique, université de Sidi Bel Abbes, 2006.
- [25] Selmane Emna, "Synthèse et caractérisation du ternaire chalcopyrite  $CuAlS_2$ ", Mémoire en chimie Minérale, Université de Tunis II, (1992).

- [26] J. E. Jaffe and Alex Zunger, Physical Review B, Vol 28, N° 10, p5822-5847,(1983).
- [27] Carmen Varea De Alvarez, Thèse, Inorganic Materials Research Division, Lawrence Berkeley Laboratory and department of physics, University of California.
- [28] Marius Grundmann, (Livre), ‘‘the Physics of Semiconductors, an Introduction Including Devices and Nanophysics’’, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2006.
- [29] V. L. Shaposhnikov et al, Physical Review B 85, 205201 (2012).
- [30] H.bennacer et al, Optik, 159 (2018) 229–244, <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2018.01.079>
- [31] M. Laalmi Abdeselem, Hadj Belkacem Mohammed 2019 (Etude des propriétés optoélectroniques du ternaire semi-conducteur ZnSnP2 Application photovoltaïque)
- [32] Kocak,B., et al.(2017)."Structural and Thermoelectronic Properties of Chalcopyrite MgSiX<sub>2</sub> (X= P, As, Sb)." Journal of Electronic Materials 46(1): 247-264.
- [33] Fahad, S., et al. (2015). "Structural, elastic, electronic, bonding, and optical properties of BeAZ<sub>2</sub> (A= Si, Ge, Sn; Z= P, As) chalcopyrites." Journal of Alloys and Compounds 646: 211-222.
- [34] Carmen Varea De Alvarez, ‘‘Electronic structure of Diamond, Zincblende and chalcopyrite semiconductors’’, Thèse, Inorganic Materials Research Division, Lawrence Berkeley Laboratory and department of physics, University of California.
- [35] M.Laalmi Abdeselem, Hadj Belkacem Mohammed 2019 (Etude des propriétés optoélectroniques du ternaire semi-conducteur ZnSnP2 Application photovoltaïque)
- [36] David L. Jones, (1974). ‘‘ The Leaching of Chalcopyrite’’, Thèse de doctorat,University of British Columbia, Vancouver 8, Canada.
- [37] IBRAHIM, M., et al. (2017). "STRUCTURAL PARAMETERS AND OPTOELECTRONIC PROPERTIES OF Mg-IV-V<sub>2</sub> (IV= Si, Ge, Sn AND V= P, As) COMPOUNDS." Surface Review and Letters: 1850108.
- [38] BENNACER Hamza Optik 159 (2018) 229-2-14.
- [39] Dj-E. Kerroum, mémoire de Magister, université Mohamed Boudiaf - Oran, Algérie, 2013.
- [40] R. Ascri, mémoire de Magister, université Mohamed Boudiaf - Oran, Algérie, 2011.
- [41] A. Nouar, mémoire de Magister, université Mohamed Boudiaf - Oran, Algérie, 2015.
- [42] C. Rincon, R. Marquez, J. Phys. Chem. of Sol., 60 (1999) 1865.
- [43] H. Takenoshita, T. Nakau, Jpn. J. Appl. Phys., 20 (1981) 1333.
- [44] A.Benaldjia,O.Guellati,W.Bounour,M.Guerioune,M.Ali-Rachedi,A.Amara,etal.,International Journal of Self-Propagating High- Temperature Synthesis 17(2008)53–56.
- [45] Moufdi Hadjab, Etude et simulation des cellules photovoltaïques à rendement élevé, Thèse de Doctorat, université Djillali Liabès de Sidi Bèl Abbès, 2018.

Chapitre II.

# Les cellules photovoltaïques

## **II. 1. Introduction**

Dans cette partie, nous allons tenter de définir un s'appliquant aux cellules photovoltaïques. Ce modèle devra rester général et la détermination de ses paramètres se fera sur bases de données fournies par les constructeurs de panneaux. Le but est ainsi d'éviter un recours, bien trop souvent nécessaire dans le cas d'installations photovoltaïques, à de nombreuses expérimentations, longues et complexes. Etant donné le nombre restreint d'informations données par les constructeurs, une grande précision ne sera pas envisageable, mais toute personne désireuse d'estimer l'intérêt d'une installation photovoltaïque pourra avoir recours à ce modèle, sans qu'une trop grande connaissance scientifique ne soit requise, et quelle que définition de couche mince et loxydent.

## **II. 2. Historique**

Quelques dates importantes dans l'histoire du photovoltaïque [1-7] :

- En 1839 : Le physicien français modèle Edmond Becquerel découvre le processus de l'utilisation de l'ensoleillement pour produire du courant électrique dans un matériau solide. C'est l'effet photovoltaïque.
- En 1905, Einstein découvrit que l'énergie de ces quanta de lumière est proportionnelle à la fréquence de l'onde électromagnétique. L'utilisation des cellules solaire débute dans les années quarante. Le domaine spatial a besoin d'une énergie sans combustible embarqué. La recherche s'intensifie sur le photovoltaïque.
- En 1875 : Werner Von Siemens expose devant l'Académie des Sciences de Berlin un article sur l'effet photovoltaïque dans les semi-conducteurs. Mais jusqu'à la seconde Guerre Mondiale, le phénomène reste encore une curiosité de laboratoire.
- En 1954 : Trois chercheurs américains, Chapin, Pearson et Prince, mettent au point une cellule photovoltaïque à haut rendement au moment où l'industrie spatiale naissante cherche des solutions nouvelles pour alimenter ses satellites.
- En 1958 : Une cellule avec un rendement de 9 % est mise au point. Les premiers satellites alimentés par des cellules solaires sont envoyés dans l'espace.
- En 1973 : La première maison alimentée par des cellules photovoltaïques est construite à l'Université de Delaware.
- En 1983 : La première voiture alimentée par énergie photovoltaïque parcourt une distance de 4000 km en Australie.

- La première cellule photovoltaïque (ou photopile) a été développée aux États-Unis en 1954 par les chercheurs des laboratoires Bell, qui ont découvert que la photosensibilité du silicium pouvait être augmentée en ajoutant des "impuretés".

### **II.3. Vocabulaire [8]:**

Un système photovoltaïque est un dispositif qui convertit directement l'énergie du rayonnement (solaire) en énergie électrique. L'élément de base de ces systèmes est la cellule photovoltaïque, appelée aussi cellule solaire.

En bref, une cellule photovoltaïque est un composant électronique qui a la forme d'une plaque mince de dimension réduite (ceci est dû au procédé de fabrication). Elle est constituée d'une jonction entre deux couches semi-conductrices (ou entre une plaque métallique et une couche semi-conductrice) et de fils permettant de la connecter à un circuit électrique extérieur. Le matériau semi-conducteur le plus utilisé actuellement est le silicium que l'on utilise le plus souvent sous forme cristalline et dans certaines réalisations sous forme amorphe.

Etant donné le peu de puissance, ou de tension, que l'on peut extraire d'une cellule (à cause de ses dimensions réduites) elles ne sont pratiquement jamais utilisées isolément. Plusieurs cellules identiques sont donc assemblées au sein d'un module. La conception du module permet également d'offrir une protection contre les intempéries, ceci en vue de garantir une durée de vie suffisante (de l'ordre de 20 à 30 ans pour les cellules au silicium cristallin).

Les cellules d'un module sont interconnectées électriquement à l'intérieur du module. Un assemblage de plusieurs modules montés dans un même plan s'appelle un panneau, et l'ensemble de panneaux d'une installation s'appelle un champ photovoltaïque.

### **II.4. Définition d'une cellule photovoltaïque**

Les premières cellules PV à oxyde cuivreux (CuO) sont apparues en 1930, puis en sélénium (Se). En 1954, les premières cellules au silicium (Si) ont été réalisées dans les laboratoires de la compagnie Bell Téléphone aux États-Unis. Aujourd'hui des recherches sont menées afin de créer de nouvelles cellules à plus fort rendement et ayant une

certaine stabilité de leurs caractéristiques dans le temps, tout en réduisant leur coût de fabrication. Lorsque les photons sont captés et absorbés par le matériau du semi-conducteur, ils transmettent leur énergie à des électrons qui excités sont collectés afin de constituer un courant électrique global [9].

Le tableau 1.1 présente les divers matériaux les plus souvent cités et utilisés dans les capteurs actuellement commercialisés soit seul, soit associés sous forme de multicouches pour mieux couvrir la totalité du spectre solaire. Le tableau 1.1 présente aussi leur énergie de gap, pour établir une correspondance entre les divers matériaux utilisés dans les capteurs d'énergie solaire photovoltaïque et le spectre solaire [10].

Tableau II.1. Énergie de gap des principaux matériaux présents dans les capteurs solaires PV

Matériaux	InAs	Ge	GaSb	Si	InP	GaAs	CdTe	CdSe
Eg (ev)	0.35	0.67	0.72	1.11	1.29	1.35	1.45	1.74

Le matériau le plus utilisé pour les cellules solaires dites photovoltaïques, jusqu'à présent, notamment pour le terrestre reste le silicium (Si) sous de nombreuses formes (cristallin, multi cristallin, amorphe, en couche mince,...Ets) en raison de son faible coût. En raison de leur prix élevé et de leur rendement plus élevé, les cellules multicouches sont quant à elles destinées plutôt aux applications spatiales car elles présentent une meilleure fiabilité ainsi qu'une faible détérioration de leur caractéristique au cours du temps par rapport aux capteurs à base de Si. On utilise généralement deux matériaux semi-conducteurs à base de silicium, un élément tétravalent. Le premier sera dopé à l'aide d'éléments pentavalents (de matériau de type N) et le second à l'aide d'éléments trivalents (matériau de type P). Ce dopage va conduire à la création de porteurs qui pourront assurer la conduction du courant par leurs déplacements. Comme il existe deux types de dopages, il existe également deux types de porteurs :

- des porteurs chargés négativement (électron possédant une énergie suffisante pour devenir mobile) dans les matériaux de type N ;
- des porteurs chargés positivement (trous correspondant au manque d'un électron pour devenir mobile) dans les matériaux de type P; La création d'une jonction entre un matériau de type N et un autre matériau de type P va impliquer une réorganisation de la distribution des porteurs. On va ainsi

voir apparaître une zone, dite de déplétion, dans laquelle il y a peu de porteurs. Le rayonnement reçu par la jonction va fournir de l'énergie qui va avoir pour effet de faire apparaître dans cette zone une paire de porteurs. Les porteurs P ainsi créés vont avoir tendance à migrer vers le matériau P et les porteurs N vers le matériau N. En munissant ces matériaux d'une électrode chacun et en les connectant à un circuit électrique, un courant va pouvoir circuler [11].

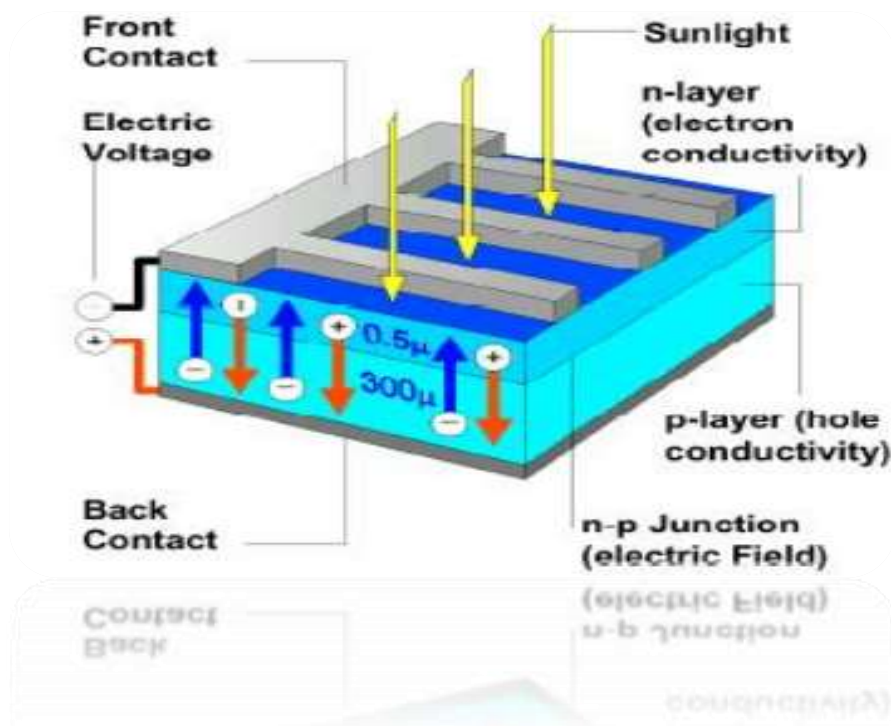


Figure II.1. Coupe schématique d'une cellule solaire

#### II.4.1. Principe de Fonctionnement d'une cellule solaire PV [12]

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.

## II.4.2. Effet photovoltaïque [13-14]

Le rayonnement solaire est constitué de photons transportant chacun une énergie  $E_{ph}$  qui répond, elle-même, à la relation suivante :

$$E_{ph} = hc/\lambda$$

Où représente  $E$  ; la quantité d'énergie,  $\lambda$  ; la longueur d'onde,  $h$  ; la constante de Planck et  $c$  la vitesse de la lumière.

D'après la relation, cette énergie est inversement proportionnelle à la longueur (1.1 d'onde). Le flux d'énergie solaire est alors transmis sous forme de rayonnements électromagnétiques dont les longueurs d'ondes sont assez différentes du corps noir dans l'espace, mais encore plus sur la terre telle quelle le montre la figure 1.1.

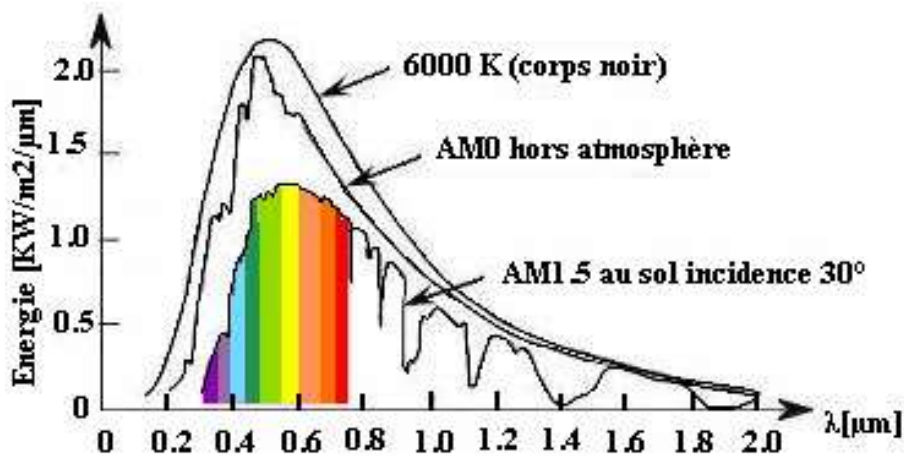


Figure II.2 Répartition spectrale du rayonnement solaire.

Dans les conditions AM0 : hors atmosphère à haute altitude.

Dans les conditions AM2 : pour atmosphère terrestre, le soleil étant à 30° sur l'horizon.

Il est à remarquer que le spectre de l'énergie solaire en atmosphère terrestre est décalé vers le rouge et l'infrarouge par rapport au spectre hors atmosphère.

Nous observons de la figure que les longueurs d'ondes du rayonnement solaire terrestre sont comprises entre 0,2  $\mu\text{m}$  (ultraviolet) et 0,4  $\mu\text{m}$  (infrarouge) avec un maximum d'énergie pour 0,5  $\mu\text{m}$ . La figure montre aussi que 97,5% de cette énergie est comprise entre 0,2  $\mu\text{m}$  et 2,5  $\mu\text{m}$ , et principalement, entre 0,4  $\mu\text{m}$  et 0,78  $\mu\text{m}$  qui correspond au visible. Les capteurs d'énergie solaire, qui correspondent aux cellules solaires devront donc être compatibles avec ces longueurs d'ondes pour pouvoir piéger les photons et les restituer sous forme d'électrons. Le tableau 1.1 donne les valeurs énergétiques caractéristiques des photons pour diverses longueurs d'onde ainsi que les zones correspondantes au spectre lumineux.

Tableau II.2. Valeurs énergétiques des photons issus du spectre solaire [15]

$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	$E_{ph}$ (ev)	Zone
0.2	6.2	Ultraviolet
0.4	3.1	Visible bleu
0.5	2.48	Visible jeune vert
0.78	1.59	Visible rouge
1	1.24	Infrarouge
2	0.62	Infrarouge
4	0.31	Infrarouge

## II.5. Différentes caractéristiques d'une cellule solaire

### II.5.1. Modèle électrique d'une cellule photovoltaïque

La (figure II.3) présente le schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque sous éclairage. Il correspond à un générateur de courant  $I_{ph}$  monté en parallèle avec une diode.

Deux résistances parasites sont introduites dans ce schéma. Ces résistances ont une certaine influence sur la caractéristique  $I = f(V)$  de la cellule [16]:

- ✓ La résistance montée en série ( $R_s$ ) représente la résistance de contact et de connexion.
- ✓ La résistance shunt ( $R_{sh}$ ) montée en parallèle représente le courant de fuite.
- ✓ Une diode en parallèle qui modélise la jonction PN.

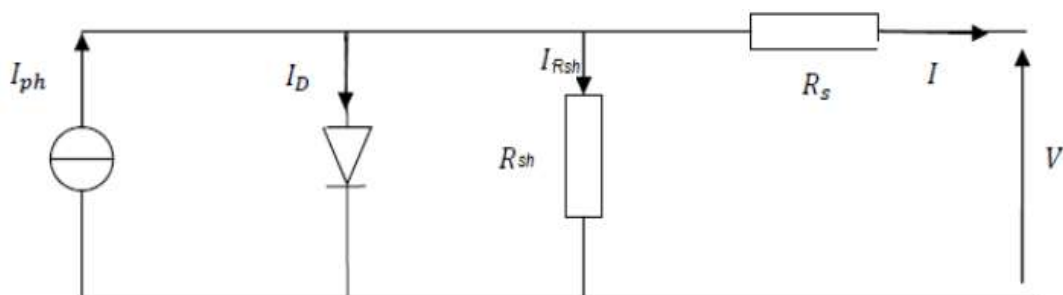


Figure II.3. Schéma équivalent électrique de la cellule PV à une diode.

### II.5.2. Les différentes caractéristiques d'une cellule solaire [17]

#### a) Courant de court-circuit $I_{sc}$

Le courant de court-circuit est le courant débité par la cellule sous éclairage en court-circuit la sortie. C'est-à-dire que :  $I_{sc} = (V = 0)$  Pour une cellule solaire idéale le courant de court-circuit est égal au courant photovoltaïque  $I_{ph}$ .

**b) Tension de circuit ouvert  $V_{oc}$**

Pour une cellule solaire idéale la tension de circuit ouvert est donné ;

$$V_{oc} = \frac{KT}{q} \ln\left(\frac{I_{ph}}{I_s} + 1\right) = V_{oc} = \frac{KT}{q} \ln\left(\frac{I_{ph}}{I_s}\right)$$

**c) Puissance maximale  $P_m$**

La puissance débitée par une cellule solaire est maximum quand le produit  $V.I$  est maximum. Si  $V_m$  et  $I_m$  sont la tension et le courant pour lesquels on a ce maximum, la puissance maximale est la surface du plus grand rectangle de coté  $V_m$  et  $I_m$  qu'on peut inscrire sous la courbe  $I(V)$ :

$$P_m = V_m \times I_m$$

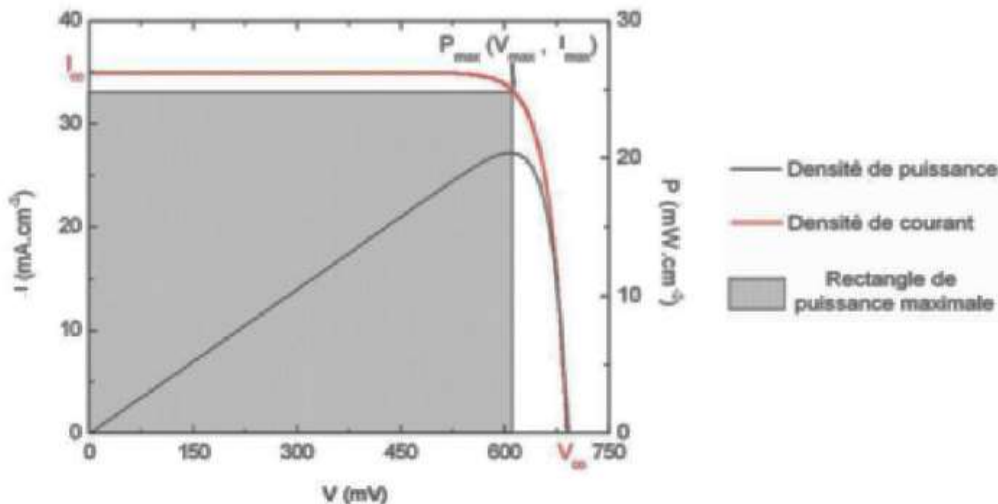


Figure II.4. Les courbes  $I = f(V)$ .  $P = f(V)$

**d) Facteur de forme FF**

Le point de fonctionnement usuel d'une cellule solaire est un point de la courbe  $I(V)$  qui correspond à une puissance maximale dissipée par la charge. On appelle Facteur de forme FF (Fill Factor), la quantité :  $FF = P_m / I_{sc} \times V_{oc}$ .

**e) Rendement de conversion  $\eta$**

Enfin, le rendement d'une cellule photovoltaïque est donné par le rapport entre la puissance débitée au point de puissance maximale et la puissance lumineuse disponible.  $\eta = \frac{P_m}{P_i}$

Où :  $P_i$  est la puissance incidente du rayonnement solaire au sol.

Dans la gamme des capteurs, dont fait partie la cellule PV, c'est aussi un des critères de qualité. Ainsi, la mesure du courant dans la cellule doit être effectuée selon des normes précises

en fixant un type de spectre lumineux, en fonction des paramètres locaux et climatiques du lieu. Nous parlons ici uniquement du rendement global de conversion d'énergie des photons en électrons traduit par la puissance électrique délivrée par les cellules PV, par rapport à un éclairement de  $1000 \text{ W/m}^2$  indépendamment de la masse d'air (AM) du milieu pour pouvoir ainsi effectuer des comparaisons des diverses performances de cellules. Il y a quelques années, les rendements de conversion étaient décevants à cause du matériau dans lequel la mobilité des charges électriques est mauvaise ainsi les techniques utilisées n'étaient pas adéquates. Depuis des publications intéressantes sont apparues dans la littérature. Ainsi des travaux de recherches ont montré qu'en utilisant des matériaux et des techniques appropriés on pourrait obtenir des rendements électriques significatifs.

Le rendement dépend du matériau utilisé et des pertes liées à la technologie mise en œuvre pour réaliser une cellule. Parmi les matériaux les plus utilisés et en raison de son faible coût, on trouve le Si sous ses différentes formes cristallines (monocristallin, polycristallin ou bien amorphe), les rendements les plus courants des modules PV actuellement commercialisés sont de l'ordre de : 12.7% pour le silicium amorphe hydrogéné, 15% pour le silicium multicristallin et 23% pour le silicium monocristallin. De nombreux autres composés ont fait l'objet d'études, notamment les hétérojonctions à base de sulfures (CdS et Cu<sub>2</sub>S) puis plus récemment à base d'Arséniure de Gallium (GaAs) pour lesquels des rendements prometteurs en laboratoire ont été obtenus et dépassent les 25%, de nouveaux composés comprenant au minimum trois matériaux différents, sous forme de couches superposées ont été réalisées en laboratoire et ont produit des rendements supérieurs à 30%.

## **II.6. Couches minces**

### **II.6.1. Définition**

Une couche mince est une fine pellicule d'un matériau déposée sur un autre matériau. Ce dernier est appelé «substrat». Le but du dépôt en couches minces est de doter la surface des pièces de propriétés particulières tout en gardant le bénéfice des propriétés massives du substrat.

### **II.6.2 Bref historique de l'application des couches minces [17]**

Les couches minces sont utilisées depuis des centaines d'années. Anciennement, l'émaillage constitue un exemple de réalisation de couches minces sur des ustensiles divers. Aujourd'hui, les couches minces sont utilisées dans des domaines d'applications aussi variés que la mécanique avec les couches abrasives ou résistantes à l'usure, l'optique avec les couches réfléchissantes (miroirs), le domaine électrique avec les couches conductrices métalliques et la chimie avec les

couches protectrices contre la corrosion. Dans le domaine mécanique, l'utilisation des revêtements s'est généralisée, notamment pour améliorer la durée de vie des outils de coupe. Un des premiers revêtements utilisés dans ce domaine a été le nitrure de titane TiN au début des années 60. Les recherches effectuées sur les propriétés des outils de coupe (résistance à l'usure, résistance à l'oxydation, durée de vie) ont conduit à modifier la composition du revêtement par l'ajout d'autres éléments au binaire TiN. Nous pouvons ainsi citer l'ajout de l'aluminium qui a conduit à l'obtention de revêtements de nitrure de titane et aluminium (Ti,Al)N. Ce matériau est l'un des objets de notre travail. Les propriétés structurales (structure atomique, microstructure) et mécaniques (ténacité, dureté) de ces revêtements entrent en jeu pendant le processus d'utilisation. Une meilleure compréhension de l'interdépendance entre ces deux types de propriétés influence de manière positive le choix des films en fonction de leurs domaines d'utilisation. Le développement de la microélectronique a pour point de départ l'invention des premiers transistors à la fin des années 1940. Les premiers circuits intégrés sont apparus quelques années plus tard (1958) utilisant grandement les matériaux en couches minces tels que des couches métalliques, des couches semi-conductrices et des couches d'oxydes diélectriques.

Aujourd'hui, les couches minces sont utilisées dans une logique de miniaturisation des composants dans de nombreux domaines tels que l'électronique, l'optique, la photonique, le magnétisme dans ses applications pour les capteurs, les micro-actionneurs ou encore l'enregistrement magnétique (stockage de grande densité). A l'ère des nanotechnologies, les objectifs industriels actuels convergent vers une structuration des couches minces à une échelle nanométrique de plus en plus petite.

### **II.6.3. Formation d'une couche mince**

L'élaboration de couches minces se fait par plusieurs procédés. Les méthodes PVD (physical vapor deposition) et CVD sont celles qui sont généralement utilisées. La formation d'un dépôt en couche mince se fait en trois étapes [1, 2, 3].

#### ***Etape n°1 : Synthèse des espèces :***

La synthèse ou la création des espèces à déposer, sous forme de vapeur ou plasma, se fait par évaporation ou par pulvérisation, respectivement.

#### ***Etape n°2 : Transport des espèces :***

Le transport de ces espèces de la source vers le substrat peut se dérouler sans collisions entre atomes et molécules si on est en régime de flux moléculaire où le libre parcours moyen est important [19]. En revanche, si la pression partielle du matériau et/ou des gaz de l'enceinte est assez élevée, il y aura de nombreuses collisions dans le plasma pendant le transport vers le substrat.

**Etape n° 3 : Dépôt sur le substrat et croissance de la couche**

Lorsque les espèces (adatoms) arrivent un la surface des substrats, ils y perdent leur énergie graduellement [20]. Une condensation s'en suit pour former des îlots de nucléation stables. Les adatoms ont un degré de mobilité sur la surface qui dépend de leur énergie cinétique et de leur interaction avec la surface. Les îlots vont croître et se rejoignent pour former une couche continue : c'est la coalescence.

**II.6.4. L'interface revêtement substrat**

L'objectif d'un revêtement, ou d'une façon plus générale d'un traitement de surface, est de conférer à une surface d'un matériau des propriétés fonctionnelles données. L'interface entre le revêtement et le substrat détermine l'adhérence du dépôt. Il existe quatre familles d'interface [21], définies comme suit:

- 1- *L'interface abrupte* : Elle correspond à un changement brutal de composition chimique entre le dépôt et le substrat qui se fait sur une distance de 0.2 à 0.5nm. Ce type d'interface présente une très faible adhérence car elle est assurée, seulement, par les forces de Van Der Walls [19,21 ].
- 2- *L'interface de diffusion* : elle est caractérisée par changement graduel de la composition chimique dans la zone d'interface. Une variation graduelle est aussi observée dans les propriétés mécaniques (module d'Young, coefficient de dilatation) ainsi qu'une diminution des contraintes résiduelles thermiques et mécaniques [21]. Ce type d'interface présente une bonne adhérence.
- 3- *L'interface composée*: elle résulte de la formation d'un composé chimique entre le dépôt et le substrat. Ce type d'interface nécessite une diffusion au préalable. La formation d'un nouveau composé peut provoquer des contraintes résiduelles mécaniques et éventuellement une formation de fissure à l'interface. Généralement ce type d'interface présente une bonne adhérence.
- 4- *L'interface pseudo diffusion*: elle est définie par un changement graduel de la composition chimique durant le dépôt à la surface. L'adhérence est meilleure en cas de continuité dans la composition du revêtement et du substrat et dans les propriétés mécaniques.

**II.7. Les propriétés des couches minces**

Les fonctions préalablement attribuées à un revêtement doivent en définitif se traduire par des objectifs opérationnels, en lien avec des propriétés physiques quantifiables. Ainsi, il est possible de demander au système « Substrat + revêtement » de répondre au cahier des charges suivant [20].:

- ✓ Une ténacité élevée ;
- ✓ Une parfaite adhésion sur le substrat ;
- ✓ Une grande résistance à la formation et à la progression des fissures ;

- ✓ Une faible conductivité et diffusivité thermique ;
- ✓ Une haute résistance à l'oxydation ;
- ✓ Une épaisseur adéquate ;
- ✓ Une fonction barrière de diffusion.

## **II.8. Applications des couches minces [21]**

La mise en œuvre de technologies de fabrication de couches a conduit à de nombreuses applications dans des domaines très divers. Nous citons, sans être exhaustif, le domaine de la mécanique, des composants électroniques, celui des transducteurs pour capteurs, l'optique, la décoration. Selon le type d'application les procédés de fabrication sont plus ou moins complexes. Nous allons expliciter ci-dessous ces principaux domaines.

### **II.8.1. Couches de protection contre la corrosion et l'usure**

Les dépôts en couches minces peuvent aussi être employés pour protéger ou renforcer une surface, métallique de pièces qui travaillent dans des conditions sévères. Parmi les méthodes d'élaboration de revêtements destinés à la protection des pièces contre la corrosion et l'usure, on peut citer :

- ✓ la cémentation,
- ✓ la nitruration (ionique et autre)
- ✓ la galvanisation
- ✓ PVD.

### **II.8.2. Couches minces dans les composants et dispositifs électroniques**

Trois matériaux ont été principalement utilisés. En premier lieu, l'aluminium qui se présente comme matériau facile à déposer par évaporation thermique. Il est bon conducteur de l'électricité et facile à interconnecter. Il est, en outre d'un coût modique. C'est le matériau type exploité dans des circuits tels que les amplificateurs opérationnels.

### **II.8.3. Couches minces et optique**

En optique on va exploiter la technologie des couches minces pour plusieurs applications. On citera, entre autres, les cas des couches réfléchissantes et les couches « antireflet ».

## **II.9. Oxydes transparents conducteurs**

Les Oxydes transparents conducteurs (Transparent Conductive Oxides) TCOs sont des semi-conducteurs dégénérés à large gap ( $\geq 3\text{eV}$ ). Ils présentent la double propriété d'être de bons

conducteurs électriques et transparents dans le domaine du visible. En raison de l'intérêt des oxydes transparents conducteurs, beaucoup de travaux de recherche sont consacrés à l'étude et la synthèse de ces matériaux (voir figure II.5). Le premier TCO étudié et synthétisé est l'oxyde de cadmium en 1907 par K. Badeaker; ce dernier a remarqué qu'après exposition à l'air d'un film d'oxyde de cadmium, celui-ci devient transparent tout en maintenant son aspect conducteur [22]. Le premier oxyde transparent conducteur qui a été breveté pour sa découverte à l'état non dopé et à l'état dopé est l'oxyde d'étain  $\text{SnO}_2$ , ceci, respectivement en 1931 et 1942 [24,15]. En 1951, il y a eu la synthèse de l'oxyde d'indium dopé étain par la technique de pulvérisation "sputtering" par J.M. Mochel [2]. L'oxyde de zinc  $\text{ZnO}$  a été découvert en 1971 par M. Matsuoka [4]. Durant les années 2000, les recherches sur les TCOs se sont concentrées sur l'étude et la synthèse des oxydes transparents conducteurs binaires et ternaires tels que : l'oxyde de zinc étain ( $\text{Zn-Sn-O}$ ) nommé ZTO [5,6], l'oxyde de cadmium indium  $\text{Cd-In-O}$  et l'oxyde d'indium étain gallium ( $\text{Ga-In-Sn-O}$ ) [28,29]

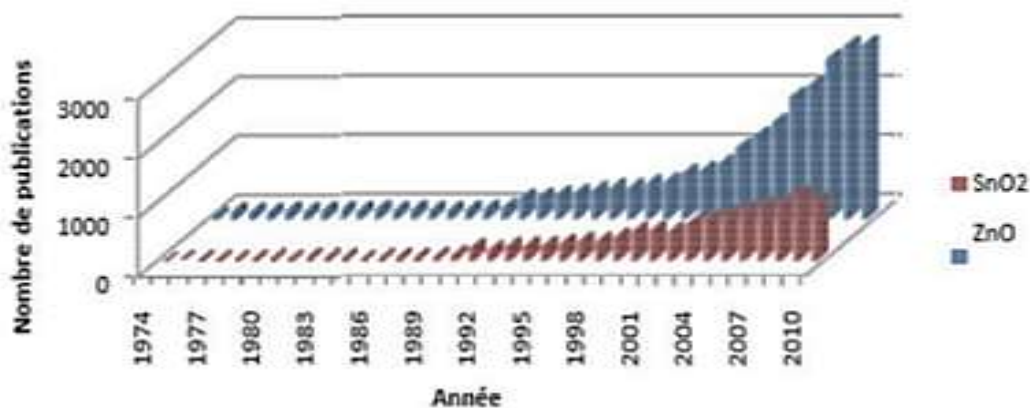


Figure II.5. Nombre de publications par année en relation avec les TCO  $\text{SnO}_2$  et  $\text{ZnO}$  (base de données ISI Knowledge)

En générale les TCOs se présentent comme des semi-conducteurs dégénérés de type n. Ces dernières années quelques TCO dopés p sont étudiés [29,30]. Durant les premières années où ces matériaux furent découverts leurs utilisations étaient limitées, essentiellement, dans les dégivreurs de pare-brise et dans l'industrie aéronautique. Depuis l'année 1975, les domaines d'utilisation des TCOs se sont diversifiés, ils sont employés dans les cellules solaires [31,32], les capteurs de gaz [11,12], l'isolation des fenêtres et l'isolation thermique, les cellules électrochimiques et le revêtement des satellites en orbite.

### II.9.1. Propriétés électriques des TCOs [20]

Les propriétés électriques des oxydes transparents conducteurs sont étudiées depuis les années 1970 [35]. Ces propriétés électriques sont décrites par celles des semiconducteurs à large gap.

Tableau II.3. Largeurs des bandes interdites de quelques TCO

TCO	Gap (ev)
SnO <sub>2</sub> [35,36]	(3.6-4.2)
ZnO [16,17]	(3.2-3.4)
In-Sn-O (ITO) [18]	4.2
Zn-Sn-O (ZTO) [26]	>3
TiO <sub>2</sub> [19]	(3-3.2)

#### II.9.1.1. Largeur de la bande interdite des TCOs

Les oxydes transparents conducteurs ont un large gap qui varie entre 3.01 et 4.6 eV (tableau II.3). Les largeurs des bandes interdites des oxydes transparents varient selon la méthode utilisée pour leurs dépôts.

#### II.9.1.2. Oxydes transparents conducteurs à l'état intrinsèque et dopés [37]

##### a. TCOs intrinsèques :

Les TCOs sont des semi-conducteurs dégénérés de type n comme nous les avons mentionnés. Ces TCOs déposés en couches minces leur conductivité électrique est due essentiellement au non stœchiométrie de ces matériaux qui fait apparaitre des lacunes d'oxygène lors de la synthèse de ces films minces. Ces lacunes augmentent la conduction, du fait qu'elles créent sous la bande de conduction des niveaux qui s'ionisent même à l'ambient (25 meV). L'oxyde d'étain présente une énergie d'une première ionisation de 30 meV sous la bande de conduction. Les atomes interstitiels participent aussi à la conduction de\_s TCOs non dopés.

**b. Dopage des TCOs**

Le dopage des oxydes transparents conducteurs se fait généralement avec des dopants de type n au regard de l'aspect dégénéré n de ce type de matériaux. Le premier dopage des TCOs, est de type n, qui est réalisé en 1947 par J.M. Mochel [2], ce dernier a dopé l'oxyde d'étain par de l'antimoine (Sb). Que ressèment que certains travaux de recherche se sont dirigés vers l'étude des TCOs dopés p .

**b.1. Dopage de type n**

Ce type de dopage se fait par le remplacement des atomes du métal ou de l'oxygène. Un tel dopage dépend de la taille du dopant et de sa solubilité dans le réseau de l'oxyde transparent conducteur. Le dopage de l'oxyde d'étain est possible avec les éléments suivants comme : le fluor (F) ,l'antimoine (Sb) ,le niobium (Nb), le Tantale (Ta), ainsi que par certains métaux comme : le cuivre (Cu), le fer (Fe), le cobalt (Co) et le nickel (Ni). Quant à l'oxyde de zinc il est dopé généralement par l'aluminium Al]mais aussi par du gallium Ga et de l'indium In.

**b.2. Dopage de type p**

Les TCOs à l'état intrinsèque sont de type n alors le dopage des TCOs de type p reste à l'état de la recherche. Ces dernières années le dopage type p [38] fait partie des études faites sur certains oxydes transparents conducteurs. L'oxyde de zinc dopé p est le TCO le plus étudié pour ce type de dopage. Il est obtenu par substitution de l'oxygène, par l'aluminium-azote Al-N, c'est souvent dit co-dopage, et par l'azote N.

**II.9.2. Etude bibliographique sur le ZnO [38]****II.9.3. Propriétés structurales de ZnO**

Les semi-conducteurs II-VI cristallisent généralement soit dans la structure sphalérite (CFC) soit dans la structure Wurtzite (HC). L'oxyde de zinc peut exister dans la nature sous forme de poudre ou de cristal massif. Il se présente sous forme de minéral [39].

Selon les conditions d'élaboration, le ZnO (Tableau II.4) peut exister sous trois différentes structures :

a. La structure hexagonale : schématisée sur la Figure II.6 (a), cette structure est stable sous les conditions normales.

Tableau II.4. Quelques propriétés générales de ZnO.

Densité (g/cm <sup>3</sup> )	5.67
Point de fusion (C°)	1975
Enthalpie de formation (kcal/mole)	83.17
Solubilité dans H <sub>2</sub> O à 29 <sup>0</sup> C (g/100ml)	0.00016

b. La structure cubique : représentée sur la Figure I.2(b), cette structure est instable et apparaît sous des pressions élevées.

c. La structure Rock–Salt: schématisée sur la Figure I.2(c), elle apparaît sous des pressions très élevées.

Dans ce qui suit on va s'intéresser uniquement aux deux premières structures, car elles possèdent des énergies de formation très voisines.

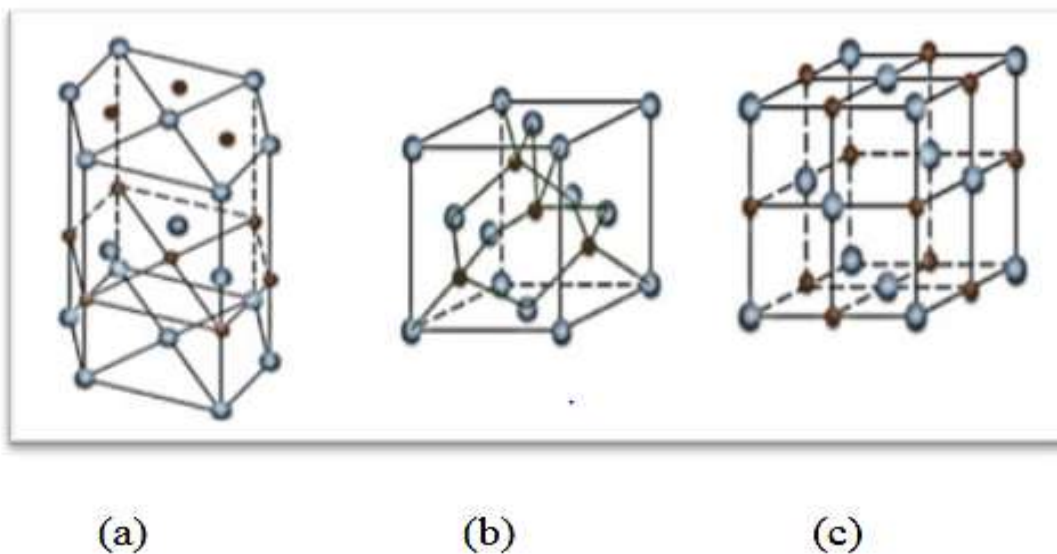


Figure II.6. Représentation des structures cristallines du ZnO : (a): hexagonal wurtzite, (b): cubique zinc blende et (c) :cubique rocksalt; (bleu : atome de zinc ; rouge : atome d'oxygène).

L'oxyde de zinc cristallise selon la structure la plus stable; c'est-à-dire la structure Wurtzite; dans laquelle les ions d'oxygène sont disposés suivant un réseau de type hexagonal compact [46,47], et les atomes de zinc occupent la moitié des positions interstitielles tétraédriques ayant le même arrangement que les ions d'oxygène (voir Figure I.3 et Figure I.4). En fait l'environnement de chaque ion n'est pas une symétrie exactement tétraédrique. La

distance entre les proches voisins dans la direction  $c$  c'est plus petite que pour les autres voisins, ceci est à l'origine de la piézoélectricité du ZnO.

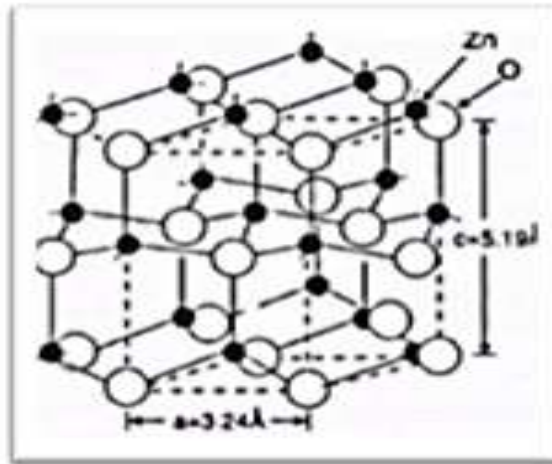


Figure II.7. La structure cristallographique de ZnO.

Chaque atome de zinc est entouré par quatre atomes d'oxygène situés aux sommets d'un tétraèdre. En fait, l'atome de zinc n'est pas exactement au centre du tétraèdre mais déplacé de  $0,11 \text{ \AA}$  dans une direction parallèle à l'axe  $c$ . Les molécules d'oxyde maintiennent donc, dans une certaine mesure, leur individualité, contrairement à ce que l'on attendrait d'un cristal purement ionique. Ce phénomène est dû à l'homopolaire des liaisons Zn-O [40].

## II.10. Conclusion

Ce chapitre nous a permis de de présenter un aperçu sur l'historique de l'énergie photovoltaïque, notions importantes sur le spectre solaire et l'air masse ainsi que le principe de la conversion photovoltaïque. Nous exposons ensuite les performances d'une cellule photovoltaïque nécessaires à la compréhension de ces dispositifs sous ensoleillement et sous obscurités. En fin, les différentes technologies des cellules solaires ont été bien discutées et plus particulièrement de celles qui feront actuellement l'objet de cette étude.

**II.11. Les références du Chapitre II**

- [1] A. Labouret, M. Viloz : « Energie solaire photovoltaïque ». Edition le Moniteur, Dunod, 2ème Edition, 2005.
- [2] M. Halouane Assia «Modélisation du transfert radiatif dans les strates supérieures d'un module photovoltaïque»,2016
- [3] G, Gomard. Cristaux photoniques pour le contrôle de l'absorption dans les cellules solaires photovoltaïques silicium ultramince. Thèse de Doctorat. Université de Lyon, 2012.
- [4] M, Urien. Cellules photovoltaïques organiques à base copolymères à blocs de type rigide-flexible, Thèse de Doctorat. Université de Bordeaux 1.2008
- [5] N. Oleksiy, thèse de Doctorat, Institut national des sciences appliquées de Lyon, France, 2005.
- [6] S. Berson, thèse de Doctorat, université Joseph Fourier – Grenoble I, France, 2007.
- [7] S. Alem-Boudjemline, thèse de Doctorat, université d'Angers, France, 2004
- [8] M. Rachid Chenni, Etude technico-économique d'un système de pompage photovoltaïque dans un village solaire, 2007
- [9] C. Alonso, thèse de Doctorat, université Paul Sabatier – Toulouse III– France, 2003.
- [10] H. Mathieu, H. Fanet, Physique des semiconducteurs et des composants électroniques, 6ème édition, Dunod, Paris, 2009.
- [11] M. I. Ziane, thèse de Doctorat, université Djillali Liabès – Sidi Bèl Abbès – Algérie, 2015.
- [12] LFODDA, A., & SAHOUANE, N. (2016). Etude de l'influence du nitrure de silicium sur la passivation en surface et en volume des cellules solaires à base de silicium multi cristallin (Doctoral dissertation, Université Ahmed Draïa-Adrar).
- [13] Moufdi Hadjab, Développement des performances d'un système photovoltaïque, Mémoire de Magister, Université Djillali Liabès de Sidi Bèl Abbès, 2011
- [14] Moufdi Hadjab, Etude et simulation des cellules photovoltaïques à rendement élevé, Thèse de Doctorat, Université Djillali Liabès de Sidi Bèl Abbès, 2018.
- [15] C. Bernard, J.Chauvin, D. Lebrun, J.F Muraz, P. Stassi « Station solaire autonome pour l'alimentation des antennes de l'expérience de radio détection l'observatoire Pierre Auger ».2006.
- [16] S. M. Ait-Cheikh, «Etude, Investigation et conception d'algorithmes de commande appliqués aux systèmes photovoltaïques», Thèse de Doctorat d'état, Ecole Nationale Polytechnique, Alger, Algérie, 2007.
- [17] A. Elfodda et N. Sahooane, (2016). Etude de l'influence du nitrure de silicium sur la passivation en surface et en volume des cellules solaires à base de silicium multi cristallin (Doctoral dissertation, Université Ahmed Draïa-Adrar).
- [18] M. Hayat Berkane, Elaboration et caractérisation de revêtements durs Ti-Al, Ti-Al-N et Al-Cr-N,
- [19] Y. Lee, G. Jeon, H. BaeG, H. Yang, Thin Solid Films, 414, 420-421 (2002).
- [20] C. Nouveau, Thèse de Doctorat n° 2116, Ecole Nationale des Arts et Métiers, Cluny, (2001)

- [21] M. Nordine, M. Larosson, S. Hogmark, *Surface and Coatings Technology*, 106, 234- (1998).
- [22] D. Lambe Y.Y. Proskuryakov, K. Durose, J. Major, M. Al Turkestani, V. Barrioz, S./ *Thin solid films* vol.518. (2009) p1222-1224.
- [23] G. Gordon/ *MRS Bulletin/* vol.25. (2000) p52-57.
- [24] Y. Saadeddin/ thèse université Bordeaux I, (2009).
- [26] M. Matsuoka/ *Japanese Journal of Applied Physics*, vol.10. (1971) p736-746.
- [27] Erslev, Peter T.; Chiang, Hai Q.; Hong, David; Wager, John F.; Cohen, J. David. *Journal of Non-Crystalline Solids* vol. 354 issue 19-25 May 1, (2008). p 2801-2804.
- [28] M.G. MacDowell, R. J. Sanderson, and I. G. Hill /*Applied Physics Letters*, vol.92 (2008) p1-3.
- [29] A. J. Freeman, K. R. Poeppelmeier, T. O. Mason, R. P. H. Chang, and T. J/ *MRS Bulletin/vol.25.* (2000), p45-51.
- [30] K. Numera/ *Nature*, vol. 432. (2004)p 488-491.
- [31] D.G. Baik, S.M. Cho/ *Thin Solid Films*, vol. 354. (1999) p227- 231.
- [32] S. Fay, U. Kroll, C. Bucher, E. Vallat-Sauvain and A. Shah/ *Solar Energy Materials & Solar Cells*, vol.86.(2005) p385-397.
- [33] H. Bo, Ma Zhong Quan a, Xu Jing b, Zhao Lei a, Zhang Nan Sheng a, Li Feng a/ *Superlattices and Microstructures*, vol. 46 (2009) p664-671.
- [34] K.D. Schierbaum, U. Weimar, W. Göpel, R. Kowalkowski/ *Sensors and Actuators B*, vol. 3. (1991) p205-214.
- [35] J. Loney et al/ *Electrocomponent Science and Technology*, vol. 2. (1976) p223-231.
- [36] T.J. Stanimirova/ *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*, vol. 7. (2005) p1335- 1340.
- [37] I. Pentair, N.Tatsuo, *Jpn. J. of Appl. Phys*, 50 (5), L245 (1985).
- [38] N.A. Goryunova, "The Chemistry of Diamand-like Semiconductors", M.I.T press (1965).
- [40] J. Joussot-Dubien, "Nouveau Traité de Chimie Minérale", vol. V, Masson & Cie. Paris (1962).

Chapitre III.  
**Résultats et discussions**

### III.1. Introduction

Dans ce chapitre, on va proposer, étudier et simuler la structure (cellules photovoltaïques) ZnO/ZnS/CdSnP<sub>2</sub> afin d'optimiser les performances de cette dernière. Donc, on va constater l'effet des différents paramètres de chaque couche sur les performances de la cellule et de les optimisés afin d'avoir un rendement de conversion optimal en utilisant l'outil de simulation wxAMPS-1D [1,]. Ce logiciel utilise l'équation de poisson, l'équation de continuité pour trou libres et l'équation de continuité d'électrons libres, par conséquence, les résultats de la caractéristique de transport sont le fruit des solutions et de ses équations, ce qui impose qu'il y a une marge de calcul a respecté pour que ce logiciel ne s'arrête pas. Voici, donc, les résultats obtenues détaillés dans les pages qui suivantes.

### III.2. Présentation du logiciel de simulation AMPS-1D

#### III.2.1 Définition du logiciel

La simulation numérique est devenue incontournable pour les recherches sur les cellules photovoltaïques, les logiciels de simulation nous donnent la possibilité d'étudier et d'interpréter les résultats obtenus, afin d'améliorer la structure et les différents composants des cellules pour optimiser leurs performances. Parmi les logiciels disponibles, notre choix c'est porté sur l'AMPS-1D [1]. L'interface principale de ce logiciel est illustrée dans la Figure III.1. Ce dernier provient de l'acronyme désignant : « Analysis of Microelectronic and Photonic Structures One Dimensional » ; (analyse unidimensionnelle des structures micro-électroniques et photoniques). Il a été conçu pour être un outil informatique pour la conception et l'analyse physique unidimensionnelle applicable à tout dispositif à deux bornes comme ; les diodes, les photo-détecteurs et les cellules photovoltaïques [1, 2]

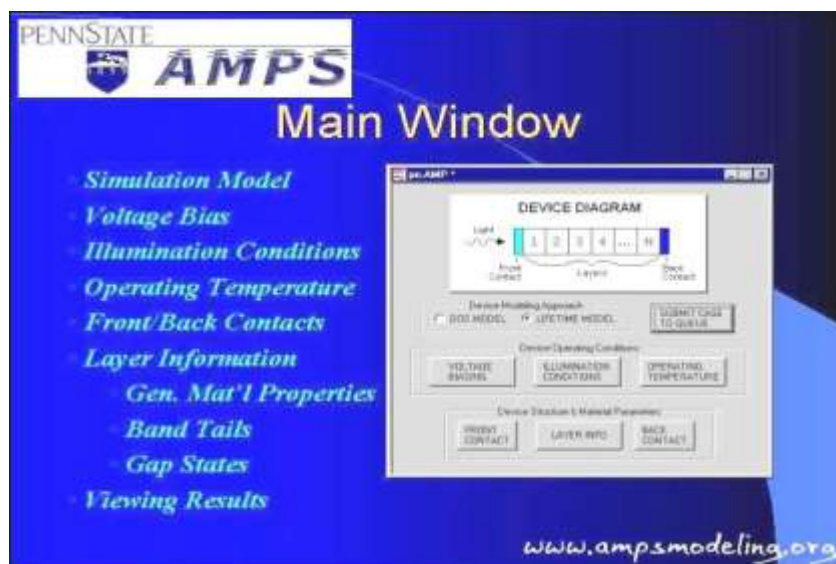


Figure III.1. Fenêtre principale du logiciel AMPS-1D

### III.2.2. Les caractéristiques d'AMPS-1D

L'AMPS-1D utilise les propriétés électroniques et optiques du matériau (gap d'énergie, l'affinité électronique, le dopage et les mobilités,... etc) à la conception des structures contrôlant l'ensemble de la physique du dispositif et sa réponse à la lumière, à la tension appliquée et à la température [3]. C'est à dire, l'AMPS-1D permet d'obtenir la réponse de la cellule à une telle situation donnée, par exemple à la polarisation par la lumière, par la tension électrique ou dans le changement de la température [4]. Et l'exploration des changements que subissent les paramètres internes du dispositif tels que le diagramme de bande, la composante du courant, le taux de recombinaison et le champ électrique en fonction de la position, de l'intensité lumineuse, de la tension électrique et de la température. Les caractéristiques électriques qu'il peut générer sont:

- Les caractéristiques ( $J-V$ ) sous illumination et sans éclairage.
- Le rendement quantique (Quantum efficiency ( $QE$ )) pour des cellules solaires et des photodiodes sous tension de polarisation et lumière.

L'interface de l'AMPS-1D (Figure III.2) est constituée de trois boîtes de dialogue. Chacune donne les paramètres nécessaires avant le lancement de la simulation par l'AMPS-1D. Les trois boîtes de dialogues donnent [3]:

- Les conditions environnementales.
- Les propriétés du matériau de chaque couche.
- Les paramètres de modélisation: le type du modèle, l'espacement de la grille pour les calculs numériques, les tensions de polarisation pour lesquelles la sortie ( $J-V$ ) et ( $QE$ ) doit être générée [3,4].



Figure III.2. Fenêtre principale du logiciel wxAMPS-1D

L'interface des conditions environnementales dans le l'AMPS-1D est illustrée sous la figure (III.3). Donc pour étudier l'effet de la température et/ou l'éclairage sur les performances de la cellule solaire on peut les varier a partir cette interface. Dans la figure (III.4) on a présenté l'interface des propriétés optoélectroniques du matériau pour chaque couche constituée la structure à simulée comme les propriétés

électroniques, les propriétés optiques et les défauts. Donc, après le choix du modèle de la cellule solaire qu'on veut la simuler, on peut étudier l'effet de l'épaisseur et le dopage de chaque couche sur les paramètres électriques de la cellule PV afin d'obtenir un rendement optimal. Par contre la figure III.5 présente les résultats de la simulation tels que : les caractéristiques J-V, le diagramme énergétique et les QE, ...

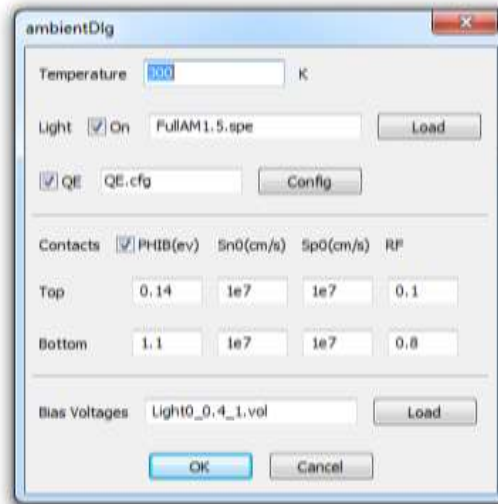


Figure III.3. L'interface des conditions environnementales et des paramètres d'entrés et de convergence.

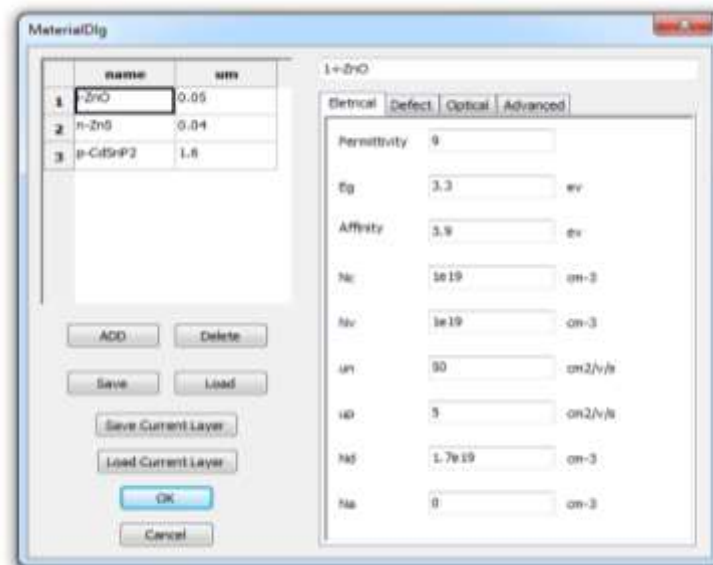


Figure III.4. L'interface des propriétés physiques du matériau.

### III.2.3 Structure de cellules photovoltaïques à base de CdSnP<sub>2</sub>

Les structures de cellules solaires en couche mince à base de CdSnP<sub>2</sub> sont constituées de plusieurs couches. L'empilement le plus couramment rencontré est représenté sur la Figure III.6. Ces structures contiennent des substrats, des couches tampons, des absorbeurs et des contacts avant et arrière.

### a. Le substrat

Le substrat est le support permettant la tenue mécanique des différentes couches, dont l'empilement ne dépasse pas quelques millimètres d'épaisseur. Il existe trois catégories de substrat: le verre, les métaux et les polymères. Il doit répondre à différents critères chimiques et mécaniques, qui le rendent apte à suivre toutes les étapes de fabrication de la cellule, sans détériorer sa qualité, tout en ayant un coût limité.

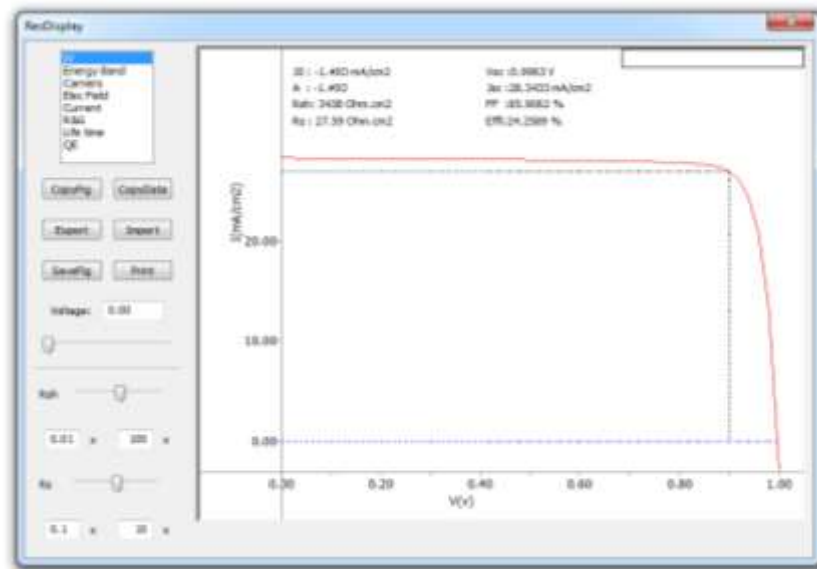


Figure III.5. L'interface de résultats

### b. Le contact métallique arrière

Le contact métallique arrière doit, comme le substrat, répondre aux différents critères mécaniques, chimiques et économiques, il nécessite une bonne conductivité électrique et une grande résistance aux hautes températures d'élaboration des couches, ainsi que, il ne doit pas être réactif avec la couche absorbante durant le procédé de fabrication. Le matériau communément utilisé par les laboratoires de recherche et en industrie est le molybdène Mo.

### c. L'absorbeur

L'absorbeur est la partie essentielle de la cellule photovoltaïque dans laquelle les photons vont être convertis en paires *électrons-trous*.

### d. La couche tampon

Généralement, la couche tampon est un matériau semi-conducteur de type *n*, sa valeur du gap énergétique doit être plus grande ou supérieure à celle de l'absorbeur. Du point de vue électrique, la couche tampon permet entre autre d'améliorer l'alignement des bandes entre la couche absorbante et la couche fenêtre et de limiter les recombinaisons des porteurs à l'interface

de ces deux couches. Elle permet également de protéger la surface de l'absorbeur durant le dépôt de la couche fenêtre, qui peut engendrer la formation de défauts à la surface de la couche absorbante.

#### e. La couche fenêtre

La couche fenêtre doit être à la fois conductrice et transparente, de façon à collecter les électrons tout en laissant passer la lumière. Cette couche est constituée d'oxyde transparent conducteur (TCO), cette couche fenêtre est constituée de deux couches, l'une fine et très résistive, l'autre épaisse et peu résistive. La première couche est le plus souvent constituée de ZnO intrinsèque, dont la haute résistivité permettrait de réduire les courants de courts-circuits entre les deux électrodes de la cellule (le Mo et la couche de TCO de faible résistivité).

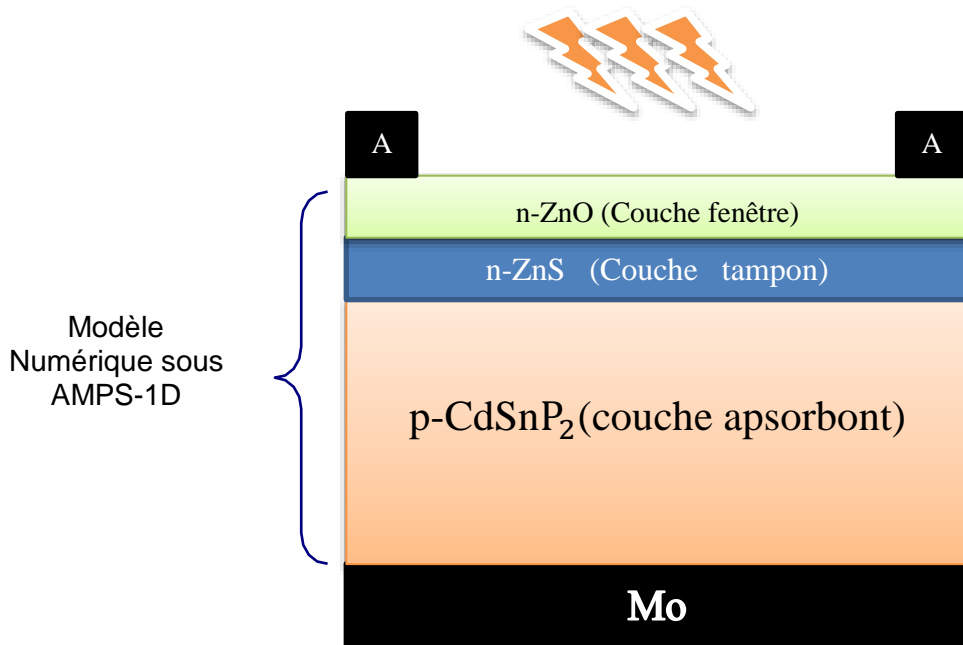


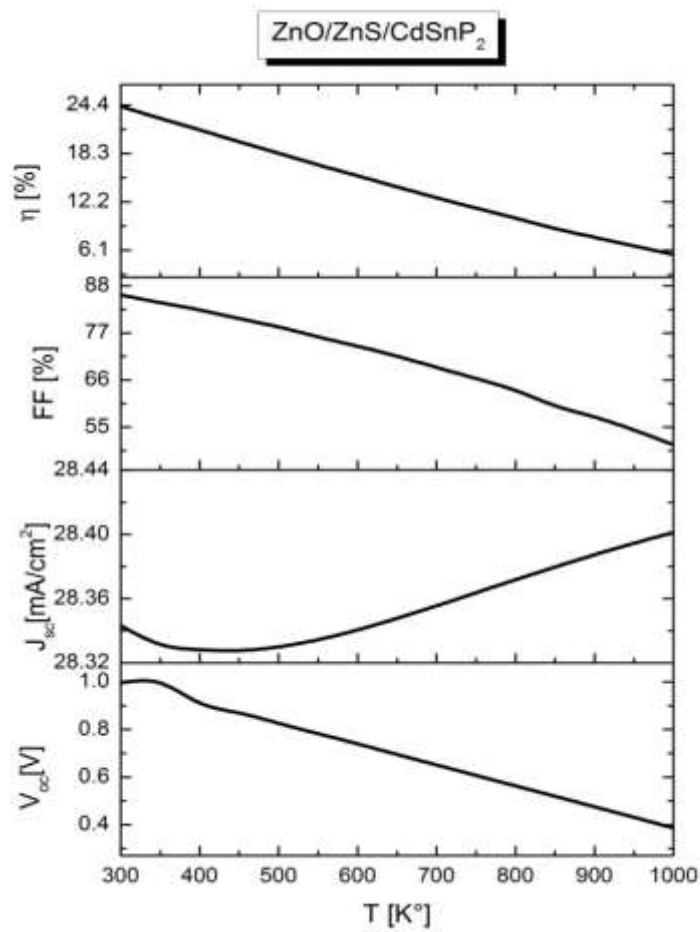
Figure III.6. Structures schématiques de cellules solaires en couches minces basées sur CdSnP<sub>2</sub> ; avec une couche tampon de ZnS

### III.3. L'étude de l'effet de température (T) sur les performances de la cellule PV

La température a une influence considérable sur le comportement de la cellule solaire photovoltaïque et donc sur le rendement. Cette influence se traduit principalement par une diminution de la tension générée et une très légère augmentation du courant.

Tableau.III.1. Les paramètres électriques en fonction de la variation de la température T.

Temperature (K°)	J <sub>sc</sub> (mA.cm <sup>-2</sup> )	V <sub>co</sub> (V)	η (%)	FF (%)
300	28.3433	0.9963	24.2589	85.9062
350	28.3316	0.99544	22.7371	84.0891
400	28.3282	0.9119	21.2816	82.3792
450	28.3278	0.8692	19.7879	80.3671
500	28.3300	0.8262	18.3507	78.4004
550	28.3345	0.7831	16.8848	76.0955
600	28.3406	0.7399	15.4958	73.8962
650	28.3478	0.6955	14.1085	71.5578
700	28.3556	0.6513	12.7366	68.9647
750	28.3637	0.6073	11.4301	66.358
800	28.3718	0.5634	10.1611	63.5625
850	28.3797	0.5197	8.8548	60.034
900	28.3873	0.4754	7.7446	57.3873
950	28.3945	0.4315	6.6553	54.3177
1000	28.4012	0.3864	5.5876	50.9195

Figure III.7. L'effet de température sur les paramètres électriques de la structure ZnO/ZnS/CdSnP<sub>2</sub>

La Figure III.7, III.8 et III.9 présentent les résultats de simulation de l'effet de variation de la température ( $T$ ) sur les performances de la structure de la cellule  $\text{ZnO}/\text{ZnS}/\text{CdSnP}_2$  en couches minces {rendement de conversion  $\eta$ , facteur de forme  $FF$ , densité de courant de court-circuit  $J_{sc}$  et la tension de circuit ouvert  $V_{oc}$ }.

Nous constatons qu'il y a une diminution du rendement de la conversion est presque linéaire avec la température ainsi que la valeur maximum de rendement (24.25%) est au-dessous de la température ambiante (300 °K)

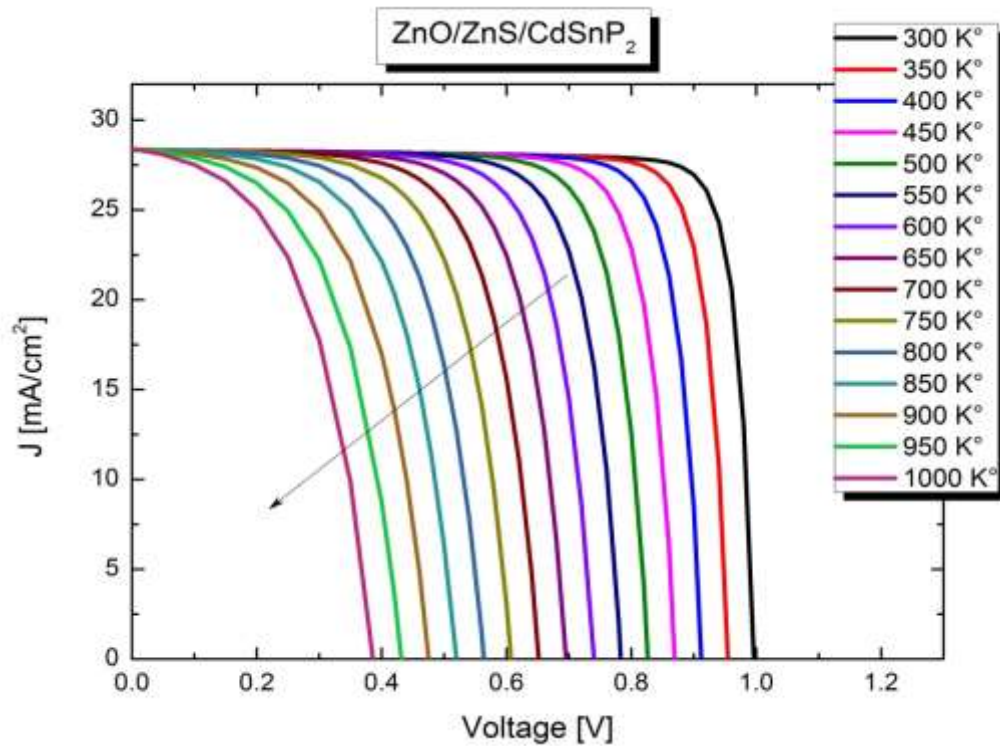


Figure III.8. L'effet de la température sur les caractéristiques J-V de la structure  $\text{ZnO}/\text{ZnS}/\text{CdSnP}_2$

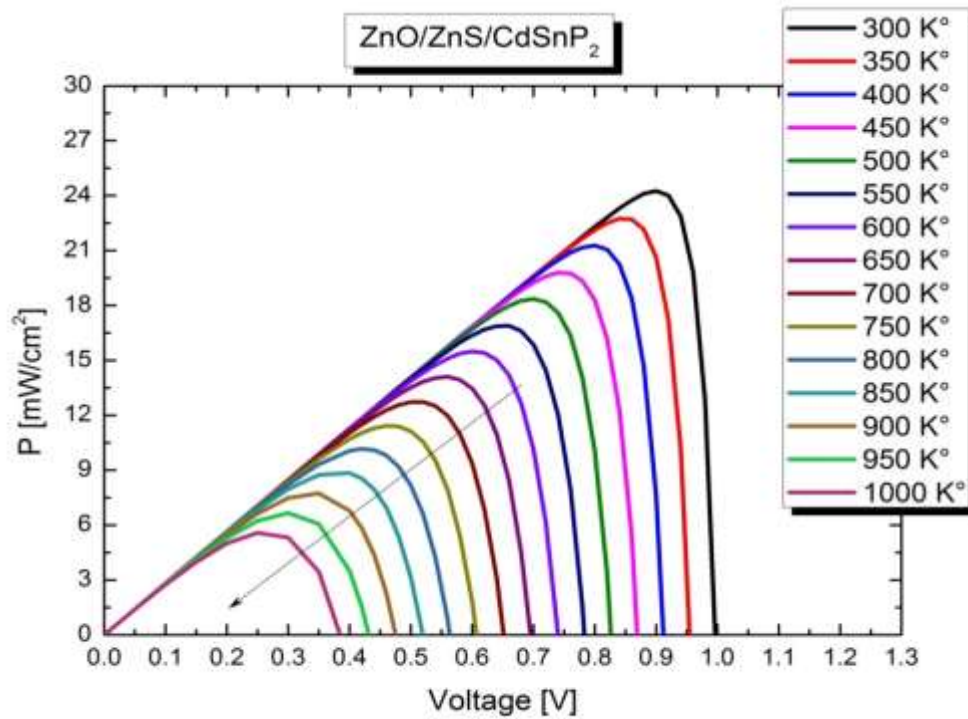


Figure III.9. L'effet de la température sur les caractéristiques P-V de la structure ZnO/ZnS/CdSnP<sub>2</sub>

### III.4. L'optimisation des différentes couches de structure

#### III.4.1. L'effet de l'épaisseur de chaque couche sur la performance de la cellule PV

Dans cette partie, Nous devons analyser et interpréter les résultats pour déterminer l'influence des paramètres physiques et technologiques sur les performances du dispositif tels que le dopage et l'épaisseur afin d'obtenir un rendement de conversion optimal. Les paramètres électroniques nécessaires pour la simulation sont résumés dans le tableau III.2.

Tableau III.2. Paramètres définis pour la simulation avec wxAMPS-1D.

Couches Paramètres	<i>n</i> - ZnO	<i>n</i> -ZnS	<i>p</i> -CdSnP <sub>2</sub>
W[nm]	50	Variable	Variable
$\epsilon_r$	9	10	10.5
$\chi$ [eV]	4.4	4.2	4.05
E <sub>g</sub> [eV]	3.3	3.68	1.218
$\mu_n$ [cm <sup>2</sup> /Vs]	50	50	2000
$\mu_p$ [cm <sup>2</sup> /Vs]	5	20	150
N <sub>c</sub> [cm <sup>-3</sup> ]	1×10 <sup>19</sup>	1.5×10 <sup>18</sup>	3×10 <sup>14</sup>

$N_v$ [ $\text{cm}^{-3}$ ]	$1 \times 10^{19}$	$1.8 \times 10^{19}$	$1 \times 10^{16}$
Concentrations des dopants $N_A$ , $N_D$ [ $\text{cm}^{-3}$ ]	$N_D = 1.7 \times 10^{19}$	Variable	Variable

### III.4.2. Effet de l'épaisseur des couches en $\text{CdSnP}_2$ et $\text{ZnS}$

Dans le tableau (III.3), nous représentons les paramètres de la cellule photovoltaïque obtenus par la simulation tel-que le courant de court-circuit  $J_{sc}$ , la tension de circuit ouvert  $V_{co}$ , le rendement et le facteur de forme FF. Nous remarquons que la variation de l'épaisseur de la couche en  $\text{CdSnP}_2$  (P) a une influence sur les performances de la cellule solaire. D'après la figure III.10 (a) on note qu'il y a une augmentation presque rapide jusqu'à ce qu'elle se stabilise à une certaine valeur de l'épaisseur de la couche absorbante (1600 nm). Cette valeur optimale est à prendre en compte dans la simulation d'optimisation.

Tableau III.3. L'effet de l'épaisseur de la couche  $\text{CdSnP}_2$  dopée (P) sur les performances de la cellule PV

L'épaisseur de la couche $\text{CdSnP}_2$ (P)	$J_{sc}$ ( $\text{mA} \cdot \text{cm}^{-2}$ )	$V_{co}$ (V)	$\eta$ (%)	FF (%)
0.1	19.7631	0.8411	14.3337	86.2295
0.2	24.2022	0.8486	17.7224	86.2940
0.3	26.1116	0.8569	19.1853	85.7316
0.35	26.6750	0.8615	19.6040	85.7316
0.4	27.0819	0.8664	19.9534	85.3045
0.45	27.3840	0.8747	20.2377	85.0431
0.5	27.6104	0.8855	20.4502	84.4871
0.55	27.7808	0.9008	20.6742	83.6468
0.6	27.9083	0.9161	20.9152	82.6153
0.65	28.0013	0.9297	21.2588	81.8067
0.7	28.0648	0.9418	21.6051	81.6651
0.75	28.1011	0.9494	21.8813	81.7387
0.8	28.1104	0.9570	22.1777	82.0175
0.85	28.0940	0.9623	22.4055	82.8745
0.9	28.0581	0.9661	22.5811	83.3064
0.95	28.0171	0.9697	22.7668	83.7953
1	27.9874	0.9734	22.9456	84.2283
1.1	27.9795	0.9802	23.2237	84.6774
1.2	28.0094	0.9836	23.4345	85.0628
1.3	28.0496	0.9869	23.6121	85.3014
1.4	28.0908	0.9900	23.8073	85.6055
1.5	28.1298	0.9931	23.9667	85.7918
1.6	28.1656	0.9961	24.0991	85.8979
1.7	28.1979	0.9990	24.211	85.9475

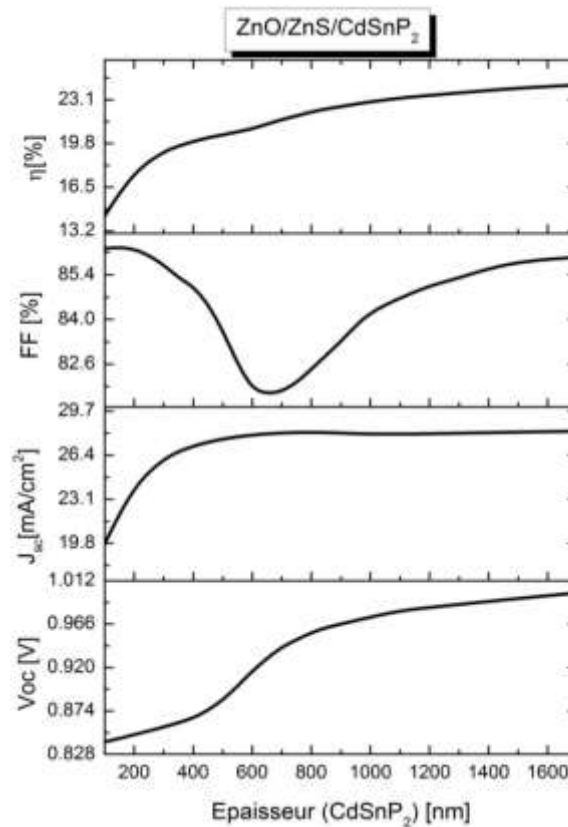


Figure III.10. L'effet de la variation de l'épaisseur de la couche absorbante sur les performances de la cellule PV

### III.4.3. L'effet de l'épaisseur de la couche en ZnS sur la performance de la cellule PV

Dans le tableau (III.4), nous représentons les caractéristiques électriques de la cellule PV obtenus par la simulation en fonction de l'épaisseur de la couche en ZnS (n) tels que le courant de court-circuit  $J_{sc}$ , la tension de circuit ouvert  $V_{co}$ , le rendement et le facteur de forme. Si on regarde de près la figure II.11, on remarque que les courbes partent très rapidement d'une valeur minimale vers une valeur maximale, puis directement de celle-ci vers une très grande diminution, notamment la figure liée au rendement, alors on prendra cette valeur maximale, qui est situé entre 30-50 nm

Tableau III.4. L'effet de l'épaisseur de la couche ZnS sur les performances de la cellule PV

L'épaisseur de la couche ZnS (n) en $\mu\text{m}$	$J_{sc}$ (mA.cm-2)	$V_{co}$ (V)	$\eta$ (%)	FF (%)
0.01	29.3137	0.9975	25.1319	85.9477
0.02	28.9104	0.9970	24.7691	85.9318
0.03	28.5262	0.9965	24.4235	85.9150
0.04	28.1656	0.9961	24.0991	85.8979
0.05	27.8240	0.9957	23.7919	85.8804
0.06	27.4993	0.9953	23.4998	85.8623
0.07	27.1899	0.9949	23.2215	85.8437
0.08	26.8949	0.9945	22.9560	85.8248

0.09	26.6131	0.9942	22.7024	85.8056
0.1	26.3403	0.9938	22.4569	85.7860
0.11	26.0832	0.9935	22.2256	85.7667
0.12	25.8369	0.9932	22.0040	85.7476
0.13	25.6009	0.9929	21.7918	85.7284
0.14	25.3747	0.9926	21.5882	85.7092
0.15	25.1576	0.9924	21.3929	85.6901
0.16	24.9492	0.9921	21.2054	85.6710
0.17	24.7489	0.9919	21.0253	85.6520
0.18	24.5564	0.9916	20.8522	85.6331
0.19	24.3713	0.9914	20.6856	85.6144
0.2	24.1931	0.9912	20.5253	85.5958

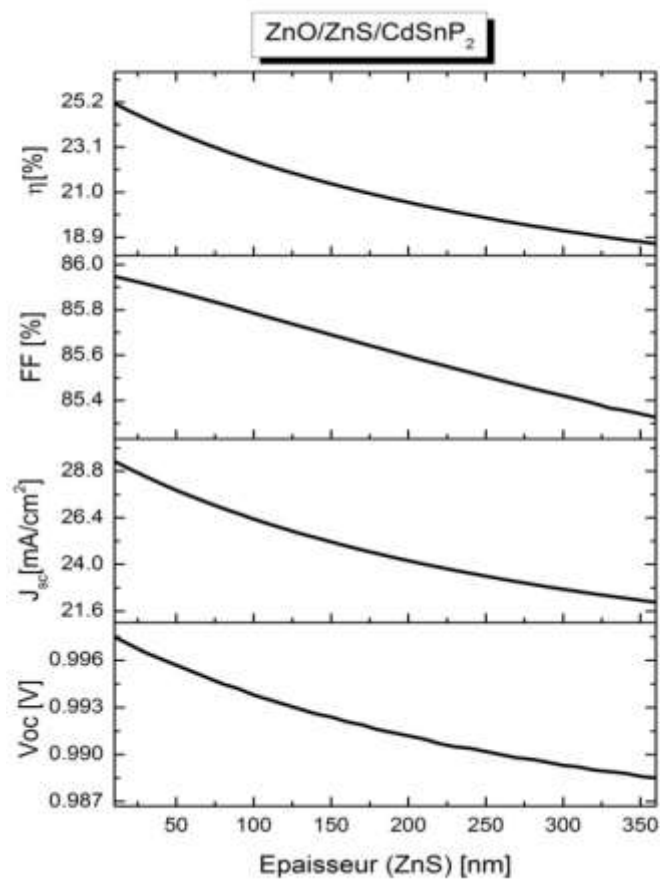


Figure III.11. L'effet de la variation de l'épaisseur de la couche tampon sur les performances de la cellule PV

### III.5. L'effet du dopage de chaque couche sur la performance de la cellule PV

Pour étudier l'influence du dopage de chaque couche sur les paramètres de la cellule solaire, nous fixons les épaisseurs des couches par leurs valeurs optimales obtenus par l'étape précédente.

### III.5.1. L'effet du dopage de la couche absorbante CdSnP<sub>2</sub>

Nous varions la concentration de dopage N<sub>A</sub> de la couche CdSnP<sub>2</sub> dopée (p) entre 10<sup>13</sup> et 10<sup>15</sup> cm<sup>-3</sup>, en même temps, on fixe les dopages pour le reste des couches forment la cellule.

D'après la figure (III.12) et le tableau (III.5), on constate que la variation progressive dans le dopage n'a pas une grande influence sur le rendement de conversion et le facteur de forme, même chose pour le courant de court-circuit et la tension de circuit ouvert. Il faut noter qu'il existe une valeur optimale (N<sub>A</sub>= 1.95×10<sup>15</sup> cm<sup>-3</sup>) que nous prendrons en compte dans la suite des simulations numériques.

Tableau III.5. L'effet de dopages de la couche CdSnP<sub>2</sub> sur les performances de la cellule PV

Dopage N <sub>A</sub> de la couche CdSnP <sub>2</sub> (p)	J <sub>sc</sub> (mA.cm <sup>-2</sup> )	V <sub>co</sub> (V)	η (%)	FF (%)
4×10 <sup>13</sup>	28.5585	0.8850	21.6685	85.7289
6×10 <sup>13</sup>	28.5583	0.8873	21.7006	85.6372
8×10 <sup>13</sup>	28.5581	0.8899	21.7593	85.6154
1×10 <sup>14</sup>	28.5578	0.8930	21.8181	85.6154
2×10 <sup>14</sup>	28.5555	0.9083	22.0976	85.1895
2.95×10 <sup>14</sup>	28.5511	0.9234	22.4728	85.2431
4×10 <sup>14</sup>	28.5420	0.9370	22.8360	85.3911
4.8×10 <sup>14</sup>	28.5330	0.9444	23.0352	85.4955
6×10 <sup>14</sup>	28.4999	0.9537	23.2788	85.6460
7×10 <sup>14</sup>	28.4645	0.9609	23.4220	85.6376
8×10 <sup>14</sup>	28.4271	0.9649	23.5059	85.6956
8.5×10 <sup>14</sup>	28.4096	0.9669	23.5399	85.6912
9×10 <sup>14</sup>	28.3932	0.9690	23.6032	85.7899
1×10 <sup>15</sup>	28.3633	0.9731	23.7004	85.8690
1.05×10 <sup>15</sup>	28.3496	0.9752	23.7378	85.8640
1.1×10 <sup>15</sup>	28.3365	0.9772	23.7697	85.8365
1.15×10 <sup>15</sup>	28.3240	0.9793	23.7972	85.7915
1.2×10 <sup>15</sup>	28.3119	0.9807	23.8205	85.7925
1.25×10 <sup>15</sup>	28.3003	0.9817	23.8405	85.8105
1.3×10 <sup>15</sup>	28.2891	0.9827	23.8577	85.8173
1.35×10 <sup>15</sup>	28.2781	0.9838	23.8726	85.8146
1.4×10 <sup>15</sup>	28.2675	0.9848	23.8854	85.8037
1.45×10 <sup>15</sup>	28.2572	0.9858	23.8965	85.7857
1.5×10 <sup>15</sup>	28.2471	0.9868	23.9170	85.8004
1.55×10 <sup>15</sup>	28.2373	0.9879	23.9457	85.8442
1.6×10 <sup>15</sup>	28.2277	0.9889	23.9718	85.8774
1.65×10 <sup>15</sup>	28.2183	0.9899	23.9954	85.9014
1.7×10 <sup>15</sup>	28.2090	0.9909	24.0168	85.9170
1.75×10 <sup>15</sup>	28.2000	0.9920	24.0364	85.9253
1.8×10 <sup>15</sup>	28.1912	0.9930	24.0543	85.9269
1.85×10 <sup>15</sup>	28.1825	0.9940	24.0706	85.9224
1.9×10 <sup>15</sup>	28.1740	0.9951	24.0855	85.9126
1.95×10 <sup>15</sup>	28.1656	0.9961	24.0991	85.8979

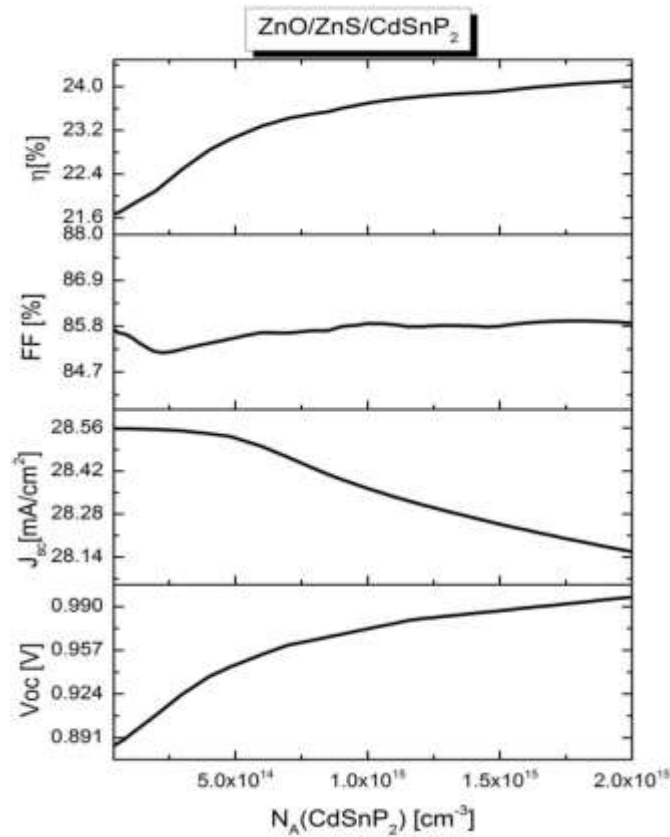


Figure.III.12. L'effet de la variation des concentrations des dopants  $N_A$  sur les performances de la cellule PV

### III.5.2. Effet du dopage de la couche en ZnS sur le rendement

Nous varions la concentration de dopage  $N_d$  de la couche Si dopée (n) entre  $2e^{18}$  et  $2.3e^{19} \text{cm}^{-3}$ , en même temps, on fixe les concentrations des dopants pour le reste des couches forment la cellule.

D'après la figure (III.13) et le tableau (III.6), on constate que la variation progressive dans le dopage n'a pas une grande influence sur le rendement de conversion et le facteur de forme, même chose pour le courant de court-circuit et la tension de circuit ouvert.

Tableau III.6. L'effet de dopages de la couche ZnS dopé (n) sur les performances De la cellule PV

Dopage $N_d$ de la couche ZnS (n)	$J_{SC}$ ( $\text{mA} \cdot \text{cm}^{-2}$ )	$V_{co}$ (V)	$\eta$ (%)	FF (%)
$2 * 10^{18}$	28.1490	0.9961	24.0834	85.8923
$3 * 10^{18}$	28.1592	0.9961	24.0931	85.8957
$4 * 10^{18}$	28.1611	0.9961	24.0950	85.8970
$4.8 * 10^{18}$	28.1656	0.9961	24.0991	85.8979
$5 * 10^{18}$	28.1652	0.9961	24.0988	85.8980
$6 * 10^{18}$	28.1522	0.9961	24.0864	85.8950
$7 * 10^{18}$	28.1455	0.9961	24.0802	85.8946
$8 * 10^{18}$	28.1447	0.9961	24.0795	85.8946
$9 * 10^{18}$	28.1388	0.9961	24.0742	85.8943
$1 * 10^{19}$	28.1332	0.9960	24.0691	85.8941

$1.1 \times 10^{19}$	28.1280	0.9960	24.0644	85.8939
$1.2 \times 10^{19}$	28.1230	0.9960	24.0600	85.8937
$1.3 \times 10^{19}$	28.1184	0.9960	24.0558	85.8935
$1.4 \times 10^{19}$	28.1140	0.9960	24.0518	85.8933
$1.5 \times 10^{19}$	28.1099	0.9960	24.0481	85.8931
$1.6 \times 10^{19}$	28.1060	0.9960	24.0446	85.8929
$1.7 \times 10^{19}$	28.1023	0.9960	24.0413	85.8928
$1.8 \times 10^{19}$	28.0988	0.9960	24.0382	85.8926
$1.9 \times 10^{19}$	28.0956	0.9960	24.0352	85.8923
$2 \times 10^{19}$	28.0925	0.9960	24.0323	85.8919
$2.1 \times 10^{19}$	28.0896	0.9960	24.0296	85.8916
$2.2 \times 10^{19}$	28.0868	0.9960	24.0271	85.8913
$2.3 \times 10^{19}$	28.0841	0.9960	24.0246	85.8910

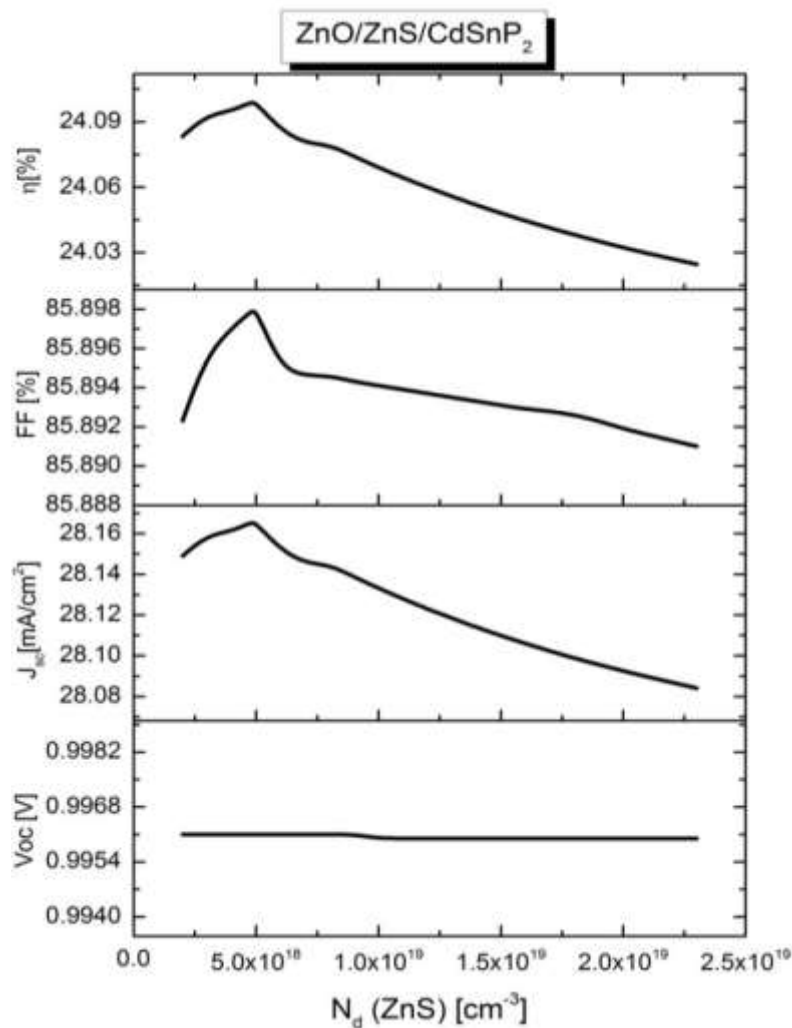


Figure.III.13. L'effet de la variation des concentrations des dopants  $N_d$  sur les performances de la cellule PV

### III.5.3. Calcul de l'efficacité quantique externe EQE

En outre, nous avons calculé l'efficacité quantique externe *EQE*, également appelée la réponse spectrale (SR), défini comme le rapport du photocourant produit par une cellule solaire

sous illumination monochromatique d'une longueur d'onde donnée, à la valeur de l'irradiation spectrale à la même longueur d'onde, c.-à-d. le rapport du nombre de charges électroniques collectées sur le nombre de photons incidents.

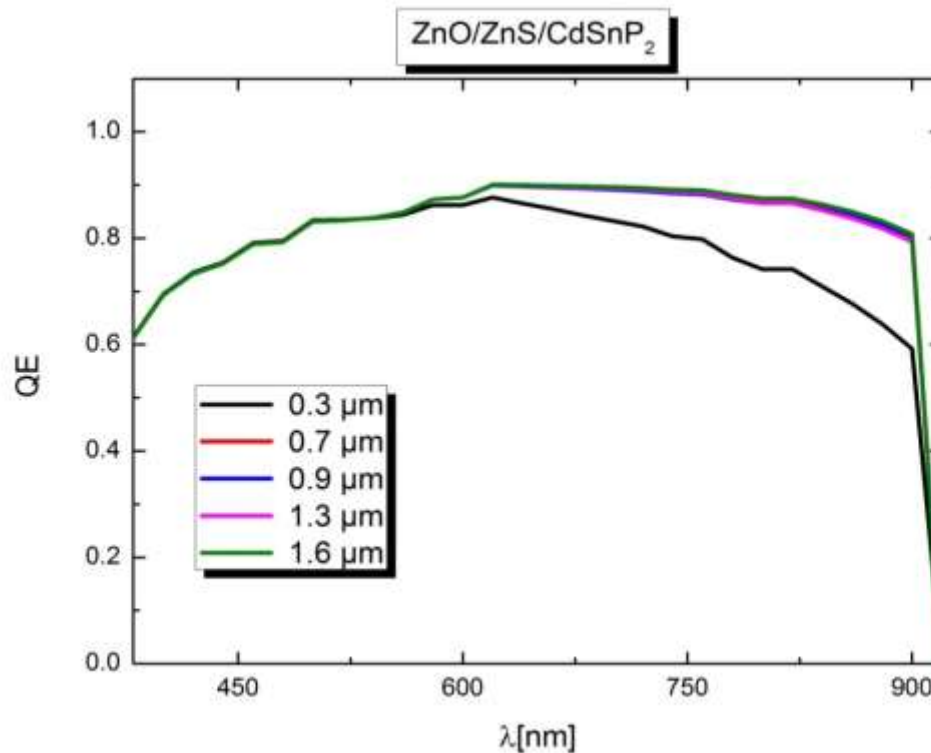


Figure.III.14.Variation de QE en fonction de la longueur d'onde pour différentes valeurs de l'épaisseur de la couche absorbante

Dans la Figure III.14, on a tracé les caractéristiques de l'efficacité quantique externe EQE de la cellule pour différentes valeurs de l'épaisseur de la couche absorbante CdSnP<sub>2</sub>. Dans cette figure, la réponse observée à des longueurs d'ondes inférieures à 630, est provoquée par l'absorption des photons dans les couches tampons ZnS. La chute aux longueurs d'onde supérieures (~ 980 nm) correspond à une valeur de l'énergie du gap de la couche CdSnP<sub>2</sub>. Par conséquent, Les courbes de l'EQE possèdent des valeurs maximales de 90% pour ZnO/ZnS/CdSnP<sub>2</sub>

#### III.5.4 Calcul des caractéristiques J-V et P-V

La Figure (III.15) présente les résultats finals de simulation des caractéristiques électriques des densités de courant-tension  $J(V)$  en [ $\text{mA}/\text{cm}^2$ ] et densités de puissance-tension [ $\text{mW}/\text{cm}^2$ ] de cellule solaire en couches minces étudiée.

D'après ces courbes de J-V et P-V nous observons la valeur de  $V_{oc}$  obtenue est trouvée à 0.99 V pour la structure ; ZnO/ZnS/CdSnP<sub>2</sub>. En ce qui concerne la densité de courant de court-circuit  $J_{sc}$ , la valeur expérimentale est de 28.34  $\text{mA}/\text{cm}^2$ . Les valeurs de rendement et de facteur de forme sont situées 24.25 % et 85.90% respectivement. Ainsi, nos résultats sont en bon accord avec des travaux théoriques d'après la

littérature. Ces résultats présentent une excellente performance par rapport aux travaux publiés.

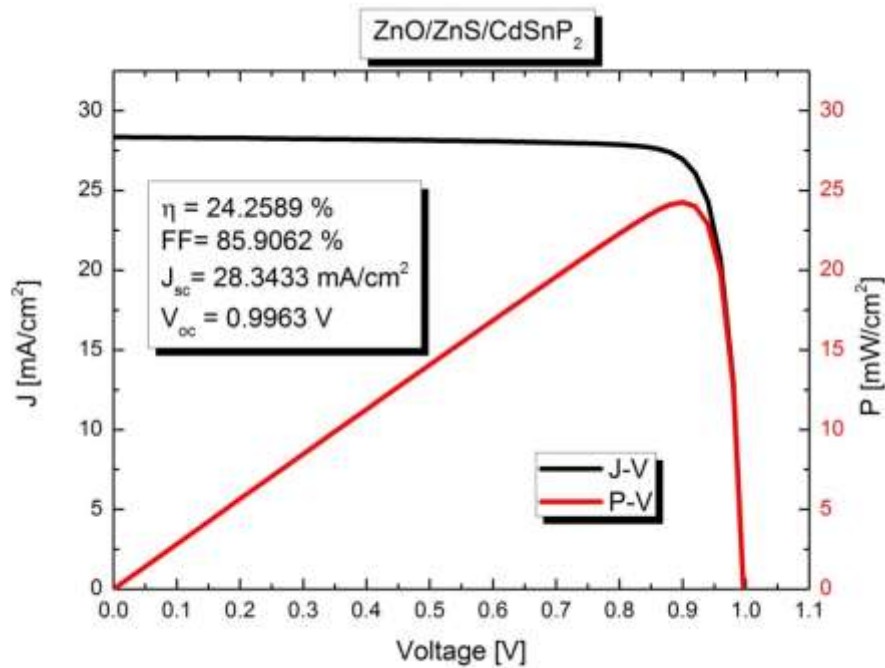


Figure III.15. Les caractéristiques électriques J-V et P-V, pour différentes épaisseurs d'absorbeur p-CdSnP<sub>2</sub>.

Le Tableau III.7 résume également nos résultats de simulation numérique concernant le rendement ( $\eta$ ), le facteur de remplissage (FF), la densité de courant de court-circuit ( $J_{sc}$ ) et la tension de circuit ouvert ( $V_{oc}$ ). On remarque que les performances optimales de la cellule ZnO/ZnS/CdSnP<sub>2</sub> sont :  $\eta = 24.25\%$ ,  $FF = 85.90$ ,  $J_{sc} = 28.34 \text{ mA/cm}^2$  et  $V_{oc} = 0.99 \text{ V}$ . Nos résultats de simulation sont en bon accord avec des travaux théoriques [3] publiés auparavant. Ces résultats présentent une excellente performance par rapport aux travaux trouvés au littérature.

Tableau III.7. Les résultats finals de l'optimisation par simulation

ZnO/ZnS/CdSnP <sub>2</sub>	ZnO	ZnS	CdSnP <sub>2</sub>	$\eta$ [%]	FF [%]	$J_{sc}$ [mA/cm <sup>2</sup> ]	$V_{oc}$ [V]
W	50 nm	40 nm	1600 nm	<b>24.25</b> 8.26 [3]	<b>85.90</b> 31.5 [3]	<b>28.34</b> 32.54 [3]	<b>0.99</b> 80.7 [3]
N <sub>A</sub>	/	/	$1.95 \times 10^{15}$				
N <sub>D</sub>	$1.7 \times 10^{19}$	$4.8 \times 10^{18}$	/				

### III.6. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté et discuté les résultats de l'étude des caractéristiques électriques de la cellule solaire à hétérojonction (n-ZnO/n-ZnS/p-CdSnP<sub>2</sub>), sous l'effet de la variation de la température ambiante (T) dans la gamme 300 K° - 1000 K°, Les résultats sont générés par le logiciel de simulation AMPS-1D, concernent la caractéristique électriques J-V, P-V, RS, J<sub>sc</sub>, V<sub>oc</sub>, FF et le rendement de conversion PV.

Nous avons étudié l'effet de la température, du dopage de la couche absorbante et la couche tampon de la structure de cellule PV en couche mince basées sur le CdSnP<sub>2</sub>. Par la suite nous avons étudié l'effet de l'épaisseur de l'absorbeur et la couche tampon sur les caractéristique électriques J-V et P-V d'une part, et sur l'efficacité quantique externe d'autre part. D'après les résultats obtenus, on distingue que les meilleurs performances sont basée sur les résultats suivants : ( $\eta = 24.25\%$ ,  $FF = 85.9\%$ ,  $J_{sc} = 28.34 \text{ mA/cm}^2$  et  $V_{oc} = 0.99 \text{ V}$ ). Ainsi, nos résultats sont en bon accord avec des travaux théoriques [3] d'après la littérature. Ces résultats présentent une excellente performance par rapport aux travaux publiés.

### **III.7. Les référence du Chapitre III**

- [1] S. J. Fonash, J. Arch, J. Cuiffi, J. Hou, W. Howland, P. McElheny, A. Moquin, M. Rogosky, T. Tran, H. Zhu, F. Rubinelli, A manual for AMPS-1D A one-dimensional device simulation program for the analysis of microelectronic and photonic structures, The Center for Nanotechnology Education and Utilization, The Pennsylvania State University, USA (1997)
- [2] Moufdi Hadjab, Etude et simulation des cellules photovoltaïques à rendement élevé, Thèse de Doctorat, Université Djillali Liabès de Sidi Bel Abbès (2018)
- [3] Ruchita Gautam, Superlattices and Microstructures 85 (2015) 859-871.

**Conclusion générale**

Nous avons utilisé comme outil de simulation pour mener notre étude paramétrique, le simulateur *wxAMPS-1D*. C'est la version moderne du logiciel original *AMPS-1D*; un logiciel dont la manipulation est relativement simple et sa base de données est conforme aux résultats expérimentaux.

Alors, on a effectué une étude de conception, d'analyse et de simulation numérique d'une nouvelle cellule photovoltaïque hétérojonction à base des matériaux élaborés numériquement. Nous avons investi les résultats des propriétés structurales, électroniques et optiques des composés binaires et ternaires tels que : ZnO, ZnS et CdSnP<sub>2</sub> pour la conception de structure de cellule photovoltaïque en couches minces. Les résultats sont générés pour la cellule PV à hétérojonction ; n-ZnO/n-ZnS/p-CdSnP<sub>2</sub>, nous avons simulé et analysé les variations de la densité des concentrations des dopants accepteurs / donneurs de la couche absorbante et tampon. Par la suite nous avons étudié l'effet de l'épaisseur de l'absorbeur et la couche tampon sur les caractéristique électriques J-V et P-V d'une part, et sur l'efficacité quantique externe d'autre part. D'après les résultats obtenus, on distingue que les meilleurs paramètres des performances qui sont  $\eta = 24.25\%$ ,  $FF = 85.9\%$ ,  $J_{sc} = 28.34 \text{ mA/cm}^2$  et  $V_{oc} = 0.99 \text{ V}$ ). Par conséquent, nos résultats sont d'une grande importance pour permettre l'amélioration technologique lors de futurs travaux expérimentaux.

Ainsi, nos résultats sont en bon accord avec des travaux théoriques d'après la littérature. Ces résultats présentent une excellente performance par rapport aux travaux publiés.

Par conséquent. En fin, nous croyons bien que nos résultats pourraient être très utiles pour ceux qui travaillent sur l'optimisation des cellules solaires de la filière des couches minces et ses applications. Les résultats sont d'une grande importance pour permettre l'amélioration technologique lors de futurs travaux expérimentaux.

## ملخص:

في هذه المذكرة، نقترح خلية ضوئية جديدة تعتمد على المركب الثلاثي كمتص، والمركب الثنائي كطبقة عازلة و ZnO كطبقة نافذة، (n-ZnO / n-CdS / p-CdSnP<sub>2</sub>). في هذا العمل، سندرس تأثير السمك وتركيز التضمين للطبقة الماصة والطبقات العازلة على أداء الخلايا الشمسية مثل؛ خصائص J-V و P-V، على وجه الخصوص؛ {كفاءة التحويل الكهروضوئية ( $\eta$ )، عامل الشكل (FF)، جهد الدائرة المفتوحة ( $V_{oc}$ ) وكثافة تيار الدائرة القصيرة ( $J_{sc}$ )} بالإضافة إلى كفاءة الكم الخارجية (EQE) لهياكل الأغشية الرقيقة، عن طريق نمذجة ومحاكاة الخلية الشمسية ZnO / n-CdS / p-CdSnP<sub>2</sub> باستخدام برنامج المحاكاة الرقمية أحادي البعد wxAMPS-1D.

الكلمات المفتاحية: الخلية الشمسية، المحاكاة، الطبقات الرقيقة، المرود، wxAMPS-1D

## Résumé :

Dans ce mémoire, nous proposons une nouvelle cellule photovoltaïque basée sur le composé ternaire CdSnP<sub>2</sub> comme absorber, le composé binaire CdS comme couche tampon et le ZnO en tant qu'une couche fenêtre, (n-ZnO/n-CdS/p-CdSnP<sub>2</sub>). Dans ce travail, nous étudions l'influence de l'épaisseur et de la concentration de dopage de la couche absorbante et la couches tampons sur les performances des cellules solaires telles que; les caractéristiques J-V et P-V, notamment; {rendement de conversion photovoltaïque ( $\eta$ ), facteur de forme (FF), tension de circuit ouvert ( $V_{oc}$ ) et la densité de courant de court-circuit ( $J_{sc}$ )} en plus de l'efficacité quantique externe (*réponse spectrale*) (EQE) pour la structures en couches minces, par modélisation et simulation de la cellule solaire ZnO/n-CdS/p-CdSnP<sub>2</sub>, en utilisant le logiciel de simulation numérique unidimensionnel wxAMPS-1D.

**Mots clés :** Cellule solaire, simulation, couches minces, rendement, wxAMPS-1D

## Abstract :

In this thesis, we propose a new photovoltaic cell based on the ternary compound CdSnP<sub>2</sub> as absorber, the binary compound CdS as a buffer layer and ZnO as a window layer, (n-ZnO/n-CdS/p-CdSnP<sub>2</sub>). In this work, we study the effect of the thickness and the doping concentration of the absorber layer and the buffer layer on the performance of solar cells such as; the J-V and P-V characteristics, in particular; {photovoltaic conversion efficiency ( $\eta$ ), fill factor (FF), open circuit voltage ( $V_{oc}$ ) and short-circuit current density ( $J_{sc}$ )} in addition to the external quantum efficiency (EQE) for thin film structure, by modeling and simulation of the n-ZnO/n-CdS/p-CdSnP<sub>2</sub> solar cell, using the wxAMPS-1D one-dimensional simulation software.

**Keywords:** Solar cell, simulation, thin films, efficiency, wxAMPS-1D.