

**UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF - M'SILA**  
**FACULTE DE TECHNOLOGIE**  
**DEPARTEMENT D'ELECTRONIQUE**



Numéro de série.....  
Numéro d'inscription.....

**Thèse**

**Présentée en vue de l'obtention du diplôme de  
DOCTORAT EN SCIENCES**

**Filière : Electronique**

**Spécialité : Microélectronique**

**Présentée par :  
BOUZIDI Amina**

**THÈME**

---

**Etude de l'influence des couches tampons pour les cellules solaires  
multi-jonctions**

---

Soutenue publiquement le : 20.05.2025

Devant le jury composé de :

<b>NOM et Prénom</b>	<b>Grade</b>	<b>Etablissement</b>	<b>Qualité</b>
BOURAS Mounir	Professeur	Université M <sup>ed</sup> Boudiaf de M'sila	Président
BESSISSA Lakhdar	Professeur	Université Ziane Achour de Djelfa	Examineur
RABEHI Abdelaziz	Professeur	Université Ziane Achour de Djelfa	Examineur
HADJLARBI Abderrahim	M.R.A.	Centre de Recherche en Technologies Industrielles (URFA-CRTI) Sétif	Examineur
BOUCHAMA Idris	Professeur	Université M <sup>ed</sup> Boudiaf de M'sila	Encadrant
HADJAB Moufdi	M.C.A.	Université M <sup>ed</sup> Boudiaf de M'sila	Co-Encadrant

Année Universitaire : 2024/2025

## **Dédié à :**

A la mémoire de mon père

A ma mère – que Dieu la protège et veille sur elle

A ma petite famille

## **REMERCIEMENTS**

*Les recherches menées dans cette thèse ont été réalisées au sein du Département d'Électronique de la Faculté de Technologie de l'Université de M'sila.*

*Je tiens à exprimer ma gratitude à Monsieur **Bouchama Idris**, professeur au département d'électronique, pour m'avoir confié cette tâche de recherche, ainsi que pour son aide et ses précieux conseils tout au long de ces années.*

*J'adresse également mes sincères remerciements à Monsieur **Hadjab Moufdi**, Maître de Conférences A, au département d'électronique, pour m'avoir co-encadré durant toutes ces années.*

*Je suis reconnaissant envers Monsieur **Bouras Mounir**, professeur au département d'électronique (Université de M'sila) de m'avoir honoré de sa présence en tant que président du jury. Je le remercie respectueusement d'avoir accepté d'évaluer ce travail.*

*Je remercie également Monsieur **Bessissa Lakhdar**, professeur à l'Université Ziane Achour de Djelfa, de m'avoir honoré de sa présence en tant que membre du jury. Je lui suis reconnaissant d'avoir accepté de juger ce travail.*

*J'exprime ma gratitude à Monsieur **Rabehi Abdelaziz**, Professeur à l'Université Ziane Achour de Djelfa, de m'avoir honoré de sa présence en tant que membre du jury. Je le remercie d'avoir accepté d'examiner cette thèse.*

*Je tiens également à exprimer ma gratitude à Monsieur **Hadjlarbi Abderrahim**, Maître de Recherche A, Centre de Recherche en Technologies Industrielles (CRT-URFA- Sétif) pour m'avoir honoré de sa présence en tant que membre du jury. Je le remercie sincèrement d'avoir accepté d'évaluer ce travail.*

*Mes remerciements vont également à tous les membres du Département d'Électronique, Faculté de Technologie, Université Mohamed Boudiaf de M'sila, pour leur soutien et leurs encouragements.*

**Bouzidi Amina**

Remerciements	
Table des matières	i
Listes des acronymes et des abréviations	v
Listes des figures et des tableaux	vii
<b>Introduction générale</b>	<b>1</b>
<b>Chapitre I. Fondements des cellules solaires photovoltaïques</b>	
I.1	Introduction 7
I.2	Définition et historique du photovoltaïque 7
I.3	Notions sur le spectre solaire et l'air masse 10
I.4.	Structure et fonctionnement des cellules photovoltaïques 12
I.4.1	L'absorption du rayonnement solaire 13
I.4.2	Conversion de l'énergie absorbée en charges électriques libres 13
I.4.3	Collecte des charges photogénérées 14
I.5.	Paramètres physiques et schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque 15
I.5.1	La courbe courant-tension (J-V) 16
I.5.1.1.	Caractéristiques (I-V) sous obscurité 16
I.5.1.2.	Caractéristiques (J-V) sous illumination 17
I.5.2	Rendement quantique et réponse spectrale 20
I.5.2.1	Réponse spectrale 20
I.5.2.2	Rendement Quantique Externe (EQE) (Rendement quantique) 21
I.5.2.3	Rendement Quantique Interne (IQE) 21
I.5.3	Schéma équivalent en circuits d'une cellule photovoltaïque 22
I.5.3.1	Modèle à une diode 23
I.5.3.2	Modèle à deux diodes 24
I.6	Les générations des cellules solaires photovoltaïques 25
I.6.1	Cellules de 1 <sup>ère</sup> génération : Cellules cristallines 25
I.6.1.1	Cellules en silicium monocristallin (c-Si) 26
I.6.1.2	Cellules en silicium polycristallin (p-Si) 26
I.6.1.3	Cellules en silicium microcristallin ( $\mu$ c-Si) 26
I.6.2	Cellules de 2 <sup>ème</sup> génération : Cellules en couches minces (Thin films) 27
I.6.2.1	Cellules à base de silicium amorphe (a-Si) 27
I.6.2.2	Cellules à base de diséléniure de cadmium (CdTe) 27
I.6.2.3	Cellules à base de diséléniure de cuivre, d'indium et de gallium (CIGS) 28

I.6.3	Cellules de 3 <sup>ème</sup> génération : Cellules à haute performance	28
I.6.3.1	Cellules à multijonctions	29
I.3.6.2	Cellules hybrides	29
I.3.6.2	Cellules organiques	29
I.7	Conclusion	29
I.8	Références bibliographiques du Chapitre I	31
<b>Chapitre II. Etat de l'art des matériaux CIGS</b>		
II.1	Introduction	34
II.2	Cellules à base de diséléniure de cuivre, d'indium et de gallium (CIGS)	35
II.2.1	Technologie des cellules solaires CIGS	35
II.2.2	Structure de la cellule en CIGS	37
II.2.2.1	Substrat	37
II.2.2.2.	Contact arrière	39
II.2.2.3	La couche absorbante	39
II.2.2.4	La couche tampon	40
II.2.2.5	La couche fenêtre avant	40
II.2.3	Diagramme énergétique des bandes de la cellule à base de CIGS	41
II.3	Propriétés physiques des matériaux Cu(In,Ga)Se <sub>2</sub>	42
II.3.1	Propriétés structurales	42
II.3.2	Propriétés optoélectroniques	45
II.4	Les techniques de dépôt du CIGS	46
II.4.1	Les techniques de dépôt à pression atmosphérique	46
II.4.1.1	Impression	46
II.4.1.2	Electrodépôt	47
II.4.2	Les techniques de dépôt à pression atmosphérique	47
II.4.2.1	Sélénisation/sulfuration de précurseurs métalliques	47
II.4.2.2	Co-évaporation	48
II.5	Configuration des cellules solaires multijonctions (CIGS)	48
II.5.1	Cellule tandem à quatre terminaux (4T)	48
II.5.2	Cellule monolithique tandem à deux terminaux (2T)	49
II.5.3	Cellule monolithique tandem à trois terminaux (3T)	50
II.5.4	Système à décomposition spectrale (split-spectrum)	50
II.6	Conclusion	52

II.7	Références bibliographiques du Chapitre II	53
<b>Chapitre III. Cadre théorique de la modélisation et de la simulation avec SCAPS-1D</b>		
III.1	Introduction	56
III.2	Qu'est-ce que la modélisation ?	57
	III.2.1 Modélisation numérique	59
	III.2.2 Modélisation analogique	59
III.3	La modélisation dans les domaines scientifiques et techniques	59
	III.3.1 Physique	59
	III.3.2 Informatique	60
	III.3.3 Biologie et sciences de la vie	60
III.4	Qu'est-ce que la simulation ?	61
	III.4.1 Simulation informatique et types de simulation	61
	III.4.2 Applications et avantages de la simulation	62
III.5	Notions fondamentales sur la conception des systèmes	62
	III.5.1 Description de la conception hiérarchique	63
	III.5.2 La spécification	64
	III.5.3 Flot de conception	64
	III.5.4 Niveaux d'abstraction	65
III.6	Logiciel de simulation numérique SCAPS-1D	65
	III.6.1 Préface	65
	III.6.2 Présentation du SCAPS-1D	66
	III.6.3 Modèle physique	66
	III.6.3.1 Equation de Poisson	67
	III.6.3.2 Equation de continuité	69
	III.6.4 Environnement de SCAPS-1D	71
	III. 6.4.1 La signification des blocs	71
	III. 6.4.2 Lancement du SCAPS-1D	73
	III. 6.4.3 Définir le problème	73
	III. 6.4.4 Définir le point de fonctionnement	74
	III. 6.4.5 Choix des paramètres de simulation	75
	III. 6.4.6 Lancer le calcul	76
	III. 6.4.7 Afficher les courbes simulées	76
	III. 6.4.8 Affichage des courbes J–V	77

III. 7	Conclusion	78
III.8	Références bibliographiques du Chapitre III	80
<b>Chapitre IV. Résultats et discussions</b>		
IV.1	Introduction	82
IV.2	Structure et paramètres d'une cellule solaire	83
IV.3	Résultats de simulation et interprétation physique	85
IV.3.1.	Simulation de la structure supérieure basée sur l'empilement n-Zn(S,O)/p-CIGS	86
IV.3.1.1	L'effets de l'épaisseur des couches n-Zn (O, S) et p-CIGS	87
IV.3.1.2	L'effet de l'épaisseur du CIGS avec différentes concentrations x	89
IV.3.2	Simulation de la structure inférieure basée sur l'empilement n-Si/p-Si	91
IV.3.2.1.	L'effet de l'épaisseur des couches n-Si et p-Si	92
IV.3.2.2	L'effet de l'épaisseur des couches sur les caractéristiques J(V) et EQE	94
IV.3.3.	Cellule solaire tandem CIGS/Si	99
IV.3.3.1.	L'effet de l'épaisseur de différentes couches tampons de la cellule supérieure	100
IV.3.3.2.	L'effet de dopage de différentes couches tampons de la cellule supérieure	104
IV.3.3.3	Effet des différents couche tampon sur les caractéristiques J-V de la cellule tandem CIGS/Si	110
IV.3.3.4	Effet des différents couche tampon sur les caractéristiques P-V de la cellule tandem CIGS/Si	111
IV.3.4	Cellule solaire tandem CIGS/ Si intégrant une couche tampon Zn(S,O)	112
IV.3.4.1.	Influence de la température sur les paramètres de la cellule tandem CIGS/Si	115
IV.4	Conclusion	119
IV.5	Références bibliographiques du Chapitre IV	121
Conclusion générale		124
Résumé – Abstract – ملخص		

## 1. Liste des symboles

### A. Constantes fondamentales

Symbole	Description	Valeur	Unité
$q$	Charge élémentaire	$1.602 \times 10^{-19}$	C
$k$ ou $k_B$	Constante de Boltzmann	$1.380649 \times 10^{-23}$	J/K
$\epsilon_0$	Permittivité du vide	$8.854 \times 10^{-12}$	F/m
$h$	Constante de Planck	$6.626 \times 10^{-34}$	J.s
$\hbar$	Constante de Planck réduite	$h/2\pi$	J.s
$c$	Vitesse de la lumière	$3 \times 10^8$	m/s
$N_A$	Nombre d'Avogadro	$6.022 \times 10^{23}$	1/mol

### B. Paramètres des semi-conducteurs

$T$	Température absolue		K (kelvin)
$n$	Concentration des électrons		$\text{cm}^{-3}$
$p$	Concentration des trous.		$\text{cm}^{-3}$
$n_i$	Concentration intrinsèque.		$\text{cm}^{-3}$
$\mu_n$	Mobilité des électrons.		$\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$
$\mu_p$	Mobilité des trous.		$\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$
$\epsilon$	Permittivité relative du matériau		-
$N_D$	Concentration des atomes accepteurs.		$\text{cm}^3$
$N_A$	Concentration des atomes donneurs.		$\text{cm}^3$
$E_g$	Energie de gap.		eV
$N_C$	Densité effective d'états des électrons dans la bande de conduction.		$1/\text{cm}^3$
$N_V$	Densité effective d'états des trous dans la bande de valence.		$1/\text{cm}^3$

### C. Équations et potentiels

$V$	Tension		V
$V_T$	Tension thermique = $KT/q$		V
$E$	Champ électrique		V/cm
$J_n$	Densité de courant des électrons		A/cm <sup>2</sup>
$J_p$	Densité de courant des trous		A/cm <sup>2</sup>
$G$	Taux de génération		$1/\text{cm}^3\cdot\text{s}$
$R$	Taux de recombinaison		$1/\text{cm}^3\cdot\text{s}$
$\psi$	Potentiel électrostatique		V
$E_c$	Bord de bande de conduction		eV

$E_v$	Bord de bande de valence	eV
$E_F$	Niveau de Fermi	eV

#### D. Paramètres spécifiques aux cellules solaires PV

$V_{co}$	Tension en circuit ouvert	V
$J_{cc}$	Courant de court-circuit	A
$V_{max}$	Tension au point de puissance maximale	V
$I_{max}$	Courant au point de puissance maximale	A
$P_{max}$	Puissance maximale fournie	W
$FF$	Facteur de forme	-
$\eta$	Rendement de conversion	%
$J_{cc}$	Densité de courant de court-circuit	mA/cm <sup>2</sup>
$J_0$	Courant de saturation inverse	A
$R_s$	Résistance série	$\Omega$
$R_{sh}$	Résistance parallèle (shunt)	$\Omega$
$QE(\lambda)$	Rendement quantique externe en fonction de la longueur d'onde	%
$\lambda$	Longueur d'onde de la lumière incidente	nm
$E$	Energie des photons	eV
$n$	Facteur d'idéalité de la diode	-
$EQE$	Rendement quantique externe	%
$IQE$	Rendement quantique interne	%

## 2. Liste des abréviations

PV	Photovoltaïque
SCAPS-1D	Solar Cell Capacitance Simulator – 1D
TCAD	Technology Computer-Aided Design
AM	Air Mass.
AM1.5	Air Mass 1.5 (standard spectrum)
Top-cell	cellule supérieure.
Bottom-cell	cellule inférieure.
Si	Silicium
CIGS	Sélénure de Cuivre et Indium et de Gallium
ZnO	oxyde de zinc.

## A. Liste des figures

Figure I.1	Le nombre de publications annuelles entre 2001 et 2023, dans lesquelles les termes (a) « <i>Solar cells</i> » et (b) « <i>Photovoltaic cells</i> » ont été utilisés (les statistiques proviennent par la maison d'édition <i>Elsevier</i> )	9
Figure I.2	Le nombre de publications annuelles sur différents types (générations) de cellules solaires au cours des vingt dernières années (Les statistiques sont issues par la maison d'édition <i>Elsevier</i> ).	10
Figure I.3	Définition de l'indice d'air masse (AM) et du spectre d'émission du rayonnement solaire, approuvé par ; American Society for Testing and Materials (ASTM G173-03)	11
Figure I.4	Illustration d'une cellule photovoltaïque réelle	12
Figure I.5	Transitions électroniques associées à un gap direct et un gap indirect	13
Figure I.6	Schémas des diagrammes de bandes pour un isolant, un semi-conducteur et un conducteur	14
Figure I.7	Structure (a) et diagramme énergétique de bande (b) d'une cellule solaire photovoltaïque (jonction pn)	15
Figure I.8	Caractéristique J-V dans l'obscurité et sous éclairage d'une cellule photovoltaïque	16
Figure I.9	Schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque : modèle à deux diodes	23
Figure I.10	Méthode de fabrication : le silicium en fusion est refroidi dans des creusets parallélépipédiques pour former un cristal, qui est ensuite découpé en fines tranches, appelées "wafers". Les cellules PV sont fabriquées à partir de ces wafers, après un processus de dopage et de traitement de surface	25
Figure II.1	Cellules solaire réelle à base de CIGS	36
Figure II.2	Structure d'une cellule CIGS, (a) Schéma du module CIGS en couches minces et (b) Image au microscope électronique à balayage MEB en coupe transversale de la cellule CIGS	38
Figure II.3	Diagramme de bandes de la cellule CIGS/CdS/ZnO (Fonctionnement de l'hétérojonction et génération du photocourant)	42
Figure II.4	Représentation de la structure cristallographique du $\text{CuInSe}_2$ (a) phase zinc-blende (b) Phase chalcopyrite et (c) Phase CuAu	43
Figure II.5	Diagramme illustrant l'évolution de la largeur de la bande interdite et du paramètre de maille $a$ pour certaines chalcopyrites. Le polygone délimite l'ensemble des valeurs de bande interdite pouvant être obtenues par l'alliage quaternaire $\text{Cu}(\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x)(\text{Se}_{1-y}\text{S}_y)$	44
Figure II.6	Structure des cellules solaires tandem à quatre terminales	49
Figure II.7	Structure d'une cellule solaire monolithique tandem à deux terminales	49

Figure II.8	Structure d'une cellule solaire monolithique tandem à trois terminales	50
Figure II.9	Principe de la séparation spectrale à l'aide d'un miroir dichroïque, dirigeant deux portions distinctes du spectre lumineux vers deux cellules solaires	51
Figure III.1	Approches de modélisation	58
Figure III.2	Approches de modélisation des dispositifs	58
Figure III.3	Description de la conception hiérarchique	64
Figure III.4	Principe de l'équation de continuité.	69
Figure III.5	Interface utilisateur principale de SCAPS-1D (version 3.3.09)	72
Figure III.6	Définir le problème, la géométrie, les matériaux et les propriétés de la cellule solaire étudiée	73
Figure III.7	Le point de fonctionnement	74
Figure III.8	Panneau des bandes d'énergie	78
Figure III.9	Panneau d'affichage des courbes I-V	79
Figure IV.1	Schéma de la cellule solaire tandem CIGS/Si à deux terminaux proposée avec jonction tunnel	83
Figure IV.2	Structure d'une cellule solaire supérieur CIGS (Top-cell)	87
Figure IV.3	Les paramètres électriques de la cellule supérieure en fonction de l'épaisseur : (a) de la couche d'absorption et (b) de la couche tampon	87
Figure IV.4	Pourcentage d'affinité, en fonction de la fraction de composition $x$ pour la cellule solaire	90
Figure IV.5	Paramètres électriques simulés du CIGS ( $x = 0.24, 0.33, 0.49$ et $0.6$ ) en fonction de leur épaisseur d'absorbeur : (a) $V_{CO}$ , (b) $J_{CC}$ , (c) FF et (d) $\eta$	91
Figure IV.6	Structure d'une cellule solaire inférieure Si (Bottom-cell)	92
Figure IV.7	Les paramètres électriques de la cellule inférieure en fonction de l'épaisseur : (a) de la couche d'absorption et (b) de la couche tampon	93
Figure IV.8	Variation des courbes $J(V)$ et EQE en fonction de l'épaisseur de la cellule supérieure CIGS: (a) variation J-V de l'absorbeur p-CIGS, (b) variation J-V de la couche de tampon n-Zn (O, S), (c) variation EQE de l'absorbeur p-CIGS et (d) variation EQE de la couche de tampon n-Zn (O, S)	96
Figure IV.9	Variation des courbes $J(V)$ et EQE en fonction de l'épaisseur de la cellule inférieure Si : (a) variation J-V de l'absorbeur p-Si, (b) variation J-V de la couche de tampon n-Si, (c) variation EQE de l'absorbeur p-Si et (d) variation EQE de la couche de tampon n-Si.	98
Figure IV.10	Fig. IV.10. Schéma de la cellule solaire tandem CIGS/Si à deux terminaux proposée avec jonction tunnel et différents couche tampon (ZnS, ZnSTe, CdS, ZnSTe, Zn(S,O)).	100
Figure IV.11	Les paramètres électriques de la cellule tandem en fonction de l'épaisseur avec différents tampons : (a) $V_{CO}$ , (b) $J_{CC}$ , (c) FF, (d) $\eta$ .	104
Figure IV.12	Les paramètres électriques de la cellule tandem en fonction de dopage avec différents tampons : (a) $V_{CO}$ , (b) $J_{CC}$ , (c) FF, (d) rendement.	109

Figure IV.13	Caractéristiques J(V) pour la cellule solaire tandem CIGS/Si avec différents couches tampons.	110
Figure IV.14	L'évolution de la puissance de sortie (W) en fonction de voltage (V) pour différentes couches tampons (CdZnS, ZnSTe, CdS, ZnS, Zn(S,O)) dans une cellule solaire tandem.	112
Figure IV.15	Caractéristiques J(V) pour la cellule inférieure Si, la cellule supérieure CIGS et la cellule solaire tandem CIGS/Si.	114
Figure IV.16	(a) Variations du $J_{CC}$ et de $V_{CO}$ (b) du FF et du $\eta$ en fonction de la température.	116
Figure IV.17	Effet de la température de fonctionnement sur les caractéristiques J(V) de la cellule solaire tandem.	117

## B. Liste des tableaux

Tableau II.1	Caractéristiques des différents substrats utilisés dans le monde pour le CIGS	38
Tableau II.2	Comparative Summary of Multijunction Solar Cell Configurations	51
Tableau IV.1	Paramètres d'entrée utilisés pour la simulation avec SCAPS-1D	85
Tableau IV.2	Paramètres $V_{CO}$ , $J_{CC}$ , FF et $\eta$ pour la cellule tandem CIGS/Si pour différents tampons.	111
Tableau IV.3	Résultats expérimentaux des rendements des cellules solaires CIGS et Si.	113
Tableau IV.4	Tableau IV.4. Résumé des résultats de performance des cellules solaires simples Si, CIGS et tandem CIGS/Si.	115
Tableau IV.5	Comparaison entre les structures proposées avec d'autres références.	118

# **Introduction générale**

Les énergies fossiles dominent encore la production mondiale, mais leur raréfaction et leur impact environnemental posent problème. La demande énergétique continue d'augmenter, surtout dans les pays en développement. Cette situation entraîne une hausse des prix et des préoccupations écologiques croissantes. Depuis le protocole de Kyoto, de nombreux pays investissent dans les énergies renouvelables sans émission de CO<sub>2</sub> [1].

Le développement de cellules solaires à haute performance offre la viabilité d'applications photovoltaïques terrestres prometteuses et à grande échelle avec un coût unitaire de puissance élevé. Les cellules solaires à jonction unique basées sur le GaAs, le Si, le CIGSe, le CdTe et les pérovskites ont été développées avec un rendement raisonnable [2]. Cependant, les cellules solaires à jonction unique peuvent atteindre un rendement AM1.5 allant jusqu'à 30 à 32 % [3]. L'état de l'art des cellules solaires à jonction unique approche la limite de Shockley-Queisser, et les développements des cellules solaires dans le contexte de leur rendement doivent prendre en compte des multi-jonctions (MJ) avec une variété de bandes interdites capables de couvrir un large spectre solaire [4-6]. L'approche MJ permettrait de réduire la thermalisation et les pertes sous la bande interdite grâce à l'utilisation de photons ayant une large gamme de fréquences [7]. Les photons à énergies plus élevées seraient absorbés par des matériaux à faible bande interdite, entraînant une perte de thermalisation, tandis que les photons à énergies plus faibles seraient utilisés pour exciter les électrons dans des matériaux à bande interdite élevée, entraînant des pertes sous la bande interdite.

Les cellules solaires tandem à base de Si [8], telles que III-V/Si [9, 10], II-VI/Si [11], chalcopyrite/Si [12], CZTS/Si [13] et pérovskite/Si [14], devraient jouer un rôle crucial. De plus, des approches de cellules solaires MJ comme pérovskite/pérovskite [15], III-V/CIGSe [16] et pérovskite/CIGSe [17] ont un potentiel fort pour faire des cellules solaires MJ des candidates prometteuses pour des applications optoélectroniques, en particulier la conversion d'énergie photovoltaïque [18]. Les cellules solaires tandem à base de Si (cellule inférieure) sont essentielles, car elles représentent le moyen direct de dépasser la limite de rendement des jonctions uniques [19]. De plus, les cellules solaires impliquant du silicium cristallin sont la technologie dominante sur le marché commercial photovoltaïque, représentant 66 % de la demande totale en 2020 [20]. Le CIGS, en tant qu'absorbeur de cellule supérieure, devient un candidat passionnant car il offre un haut rendement et une stabilité à long terme, en plus d'une production à faible coût [21]. Le CIGS est un matériau très adapté avec un coefficient d'absorption optique élevé dans la région visible, qui est excellent par rapport au silicium [21, 22]. De plus, les cellules solaires CIGS présentent une

bande interdite réglable avec une stabilité exceptionnelle en extérieur et une dureté face aux radiations.

Cette thèse vise à développer une cellule tandem CIGS/silicium combinant une sous-cellule en silicium et une autre en Cu (In, Ga) S<sub>2</sub> (CIGS) en utilisant le simulateur SCAPS 1D. Cette approche est prometteuse pour dépasser les limites de rendement des cellules en silicium seules. Les cellules tandem permettent d'exploiter une plus grande partie du spectre solaire, améliorant ainsi l'efficacité globale. En effet, dans une cellule tandem, le choix et l'optimisation de la couche tampon jouant entre l'absorbeur CIGS et la fenêtre frontale (en général ZnO) sont déterminants. La couche tampon assure la formation d'une jonction p-n de qualité, influence la transmission optique, contrôle la passivation de l'interface et réduit les phénomènes de recombinaison. Par conséquent, le matériau et l'épaisseur de cette couche affectent directement les performances globales du dispositif. Traditionnellement, le CdS a été le matériau tampon de référence grâce à sa facilité de dépôt et à sa bonne qualité interfaciale. Cependant, en raison de préoccupations environnementales liées à la toxicité du cadmium et des limitations optiques dans l'ultraviolet et le bleu, des alternatives telles que ZnS, Zn(O,S), CdZnS et ZnSTe ont été proposées à simuler. Ces matériaux présentent des bandes interdites plus larges et des propriétés électroniques adaptées, offrant la possibilité de maximiser le courant de court-circuit ( $J_{CC}$ ) tout en maintenant une tension de circuit ouvert ( $V_{CO}$ ) élevée.

Ce travail a pour objectif de déterminer les paramètres technologiques permettant d'obtenir une cellule solaire optimale, garantissant l'équilibre des courants entre la sous-cellule supérieure et la sous-cellule inférieure. Elle vise également à analyser l'influence des paramètres technologiques sur les caractéristiques  $J(V)$  de la cellule supérieure en CIGS, de la cellule inférieure en silicium et, par extension, de la cellule tandem CIGS/Si. Ainsi, l'influence de la nature du tampon de la cellule supérieure de tandem et étudier en détail le comportement et la performance d'une cellule solaire tandem CIGS/Si intégrant différentes couches tampons : CdS, CdZnS, ZnS, ZnSTe et Zn(S,O). Par la suite, l'impact de la température sur la structure optimisée sera étudié, pour enfin proposer des pistes d'amélioration des cellules solaires tandem.

Cette thèse s'articule autour de l'étude et de l'optimisation des cellules solaires, en particulier les structures tandem CIGS/Si, à l'aide du logiciel de simulation SCAPS-1D. Elle est structurée en quatre chapitres principaux.

Le **premier chapitre** introduit le domaine du photovoltaïque en définissant les cellules solaires, leur évolution historique, leur principe de fonctionnement, ainsi que leurs caractéristiques physiques et électriques. Il se conclut par une présentation des différentes générations de cellules photovoltaïques.

Le **deuxième chapitre** est consacré à l'étude des cellules solaires à base de CIGS. Il détaille la structure de ces cellules, les propriétés physiques des matériaux  $\text{Cu(In,Ga)Se}_2$ , et introduit le logiciel SCAPS-1D, utilisé pour la modélisation des dispositifs photovoltaïques.

Le **troisième chapitre** aborde les principes fondamentaux de la modélisation, en distinguant les approches analogiques et numériques. Il met l'accent sur les types de simulations, les fonctionnalités de SCAPS-1D, et la méthodologie de configuration et d'analyse des dispositifs simulés.

Le **quatrième chapitre** présente les simulations réalisées pour optimiser la cellule tandem CIGS/Si. Après l'introduction de la structure tandem et de la jonction tunnel, différentes configurations de matériaux tampons sont étudiées ( $\text{ZnS}$ ,  $\text{ZnSTe}$ ,  $\text{CdS}$ ,  $\text{CdZnS}$ ,  $\text{Zn(O,S)}$ ) afin d'analyser leur impact sur les performances électriques. L'effet de la température est également examiné pour évaluer la stabilité et l'efficacité du dispositif.

Enfin, une **conclusion générale** résume les résultats obtenus et les perspectives offertes par ce travail pour l'amélioration des cellules photovoltaïques tandem.

## **Références bibliographiques de l'Introduction générale**

- [1] A. Duchatelet, Thèse de doctorat, Université des science et technologies de Lille.
- [2] M. A. Green et al., *Prog. Photovoltaics*, 29 (3) (2021).
- [3] M. Yamaguchi, *Phys. Status Solidi C* 12, 489 (2015).
- [4] W. Shockley and H. J. Queisser, *J. Appl. Phys.*, 32, 510 (1961).
- [5] M. Yamaguchi et al., *Sol. Energy*, 79 (78) (2005).
- [6] M. Yamaguchi, *Clean Electricity from Photovoltaics*, 2nd ed., edited by M. D. Archer and M. A. Green (Imperial College Press) 307 (2015).
- [7] L. C. Hirst and N. J. Ekins-Daukes, *Prog. Photo-voltaics*, 19, 286 (2011).
- [8] M. Yamaguchi et al., *J. Phys. D: Appl. Phys*, 51, 133002 (2018).
- [9] S. Essig, et al., *Nat. Energy*, 2, 17144 (2017).
- [10] D. Lackner et al., *Sol. RRL*, 4, 2000210 (2020).
- [11] M. Carmody et al., *Appl. Phys*, 96, 153502 (2010).
- [12] K. Kim et al., *Sol. Energy*, 145, 52 (2017).
- [13] M. Valentini, et al., *Sol. Energy*, 190, 414 (2019).
- [14] S. Albrecht et al., paper presented at the 36<sup>th</sup> European Photovoltaic Solar Energy Conference, Marseille, France (2019).
- [15] R. Lin et al., *Nat. Energy*, 4, 864 (2019).
- [16] K. Makita et al., *Prog. Photovolt: Res. Appl*, 42 (8) (2019).
- [17] S. Buecheler et al., paper presented at the 7th International Workshop on CIGS Solar Cell Technology, Munich, Germany, (2016).
- [18] M. Yamaguchi et al., *J. Appl. Phys*, 129, 240901 (2021).
- [19] N. Song, et al., *Appl. Surf. Sci.*, 459, 700-706 (2018).
- [20] F. I. S. E. Systems. ISE. *Photovoltaics Report*, récupéré par :  
<https://www.ise.fraunhofer.de/content/dam/ise/de/documents/publications/studies/Photovoltaics-Report.pdf>. (Dernier accès: 01/09/2022).
- [21] M. Hadjab et al., *Int. J. Simul. Model.*, 42, 179–191 (2022).
- [22] P. Jackson et al., *Prog. Photovolt. Res. Appl.* 19, 894– 897 (2011).

# **Chapitre I**

**Fondements des cellules solaires  
photovoltaïques**

## I.1 Introduction

Depuis longtemps, l'humanité utilise l'énergie solaire, une ressource vaste qui fournit à la Terre une quantité d'énergie largement suffisante, principalement sous forme de lumière. Cette énergie est exploitée directement, par exemple en agriculture via la photosynthèse, ainsi que dans diverses applications de séchage et de chauffage, tant à l'échelle artisanale qu'industrielle [1-4]. Aujourd'hui, l'énergie solaire est au cœur de la recherche scientifique, représentant une source d'énergie renouvelable durable en pleine évolution, malgré les défis persistants auxquels elle est confrontée [5]. L'énergie solaire photovoltaïque, quant à elle, convertit une partie du rayonnement solaire en électricité grâce à des cellules photovoltaïques. Ces cellules exploitent le principe de l'effet photovoltaïque, qui génère une force électromotrice lorsqu'elles sont exposées à la lumière. Bien que l'énergie photovoltaïque soit relativement nouvelle parmi les énergies renouvelables, elle devient de plus en plus significative en raison de ses nombreux avantages : elle est abondante, non polluante, accessible partout dans le monde, et elle offre flexibilité et fiabilité [6]. La première conversion photovoltaïque a été réalisée en 1954 par le laboratoire Bell sur une jonction P-N en silicium. Depuis, divers semi-conducteurs ont été utilisés pour améliorer cette technologie. Les applications photovoltaïques, qu'elles soient terrestres ou spatiales, dépendent des propriétés optoélectroniques et thermiques des matériaux employés. Ces applications sont essentielles, en particulier dans le domaine spatial pour alimenter les satellites, et sur Terre pour l'éclairage des routes désertiques, la signalisation dans les ports, et l'alimentation des habitations isolées [7].

Ce chapitre introduit les bases essentielles pour comprendre le sujet. Nous commencerons par aborder quelques notions de base sur la source d'énergie utilisée dans le domaine photovoltaïque : le rayonnement solaire et l'Air Mass. Nous décrirons ensuite le fonctionnement et la structure de la cellule photovoltaïque standard, leurs principales caractéristiques, ainsi que les différentes générations de cellules et leurs limites en termes de rendement. Enfin, nous nous pencherons sur les cellules à base de CIGS, qui utilisent la technologie des couches minces pour améliorer les performances des cellules photovoltaïques solaires.

## I.2 Définition et historique du photovoltaïque

Le terme « photovoltaïque », souvent abrégé en PV, est dérivé des mots « photo », signifiant lumière en grec, et « Volta », en hommage au physicien italien Alessandro Volta, inventeur de la pile électrochimique en 1800. L'effet photovoltaïque désigne la conversion

directe de l'énergie solaire en électricité [8]. Le photovoltaïque est une technologie qui produit de l'électricité en courant continu (CC), mesurée en Watts (W) ou kilowatts (kW), en utilisant des semi-conducteurs exposés à des photons. Tant que la lumière éclaire la cellule solaire, qui est le composant individuel du système photovoltaïque (PV), elle génère de l'électricité. Une fois que la lumière disparaît, la production d'électricité cesse. Contrairement aux batteries, les cellules solaires n'ont pas besoin d'être rechargées. En fait, certaines fonctionnent en continu à l'extérieur, sur Terre ou dans l'espace, depuis plus de 30 ans. [9].

L'histoire du photovoltaïque débute en 1839 avec la découverte du principe photovoltaïque par le physicien français Antoine César Becquerel. Il met en évidence que certains matériaux sont capables de produire un courant électrique lorsqu'ils sont exposés à la lumière. Ce phénomène, appelé effet photovoltaïque, est plus tard reconnu en 1887 par le physicien allemand Heinrich Rudolf Hertz, qui observe que la lumière peut libérer des charges électriques de certains matériaux. Toutefois, c'est en 1923 qu'Albert Einstein fournit une explication scientifique complète du phénomène grâce à sa théorie sur l'effet photoélectrique, ce qui lui vaudra le prix Nobel de physique. Le développement de la technologie photovoltaïque franchit une étape majeure en 1955, lorsque les chercheurs américains Chapin, Fuller, Pearson et Prince, travaillant au sein des laboratoires Bell Telephone, parviennent à concevoir la première cellule photovoltaïque à haut rendement, avec une efficacité de conversion de la lumière solaire en électricité atteignant 6 %. Cette innovation marque un tournant dans l'utilisation pratique de l'énergie solaire. En 1959, seulement quatre ans après cette avancée, un premier satellite alimenté par des cellules photovoltaïques est lancé, démontrant le potentiel de cette technologie pour les applications spatiales. Les progrès ne s'arrêtent pas là : en 1973, l'Université du Delaware, aux États-Unis, réalise une percée en construisant la première maison équipée d'un système photovoltaïque intégré, un projet qui préfigure l'utilisation de cette technologie pour les bâtiments résidentiels. Dix ans plus tard, en 1983, une voiture fonctionnant uniquement à l'énergie solaire réussit à parcourir 4000 kilomètres à travers l'Australie, illustrant la diversité des applications du photovoltaïque, y compris dans les transports. À partir des années 2000, les améliorations continues dans l'efficacité des cellules photovoltaïques, combinées à la réduction progressive des coûts de production, entraînent une expansion rapide du marché mondial du photovoltaïque. En vingt ans, ce secteur a affiché une croissance annuelle soutenue de 20 % à 25 %, atteignant une capacité installée de 427 MW en 2002. Cependant, malgré cette progression impressionnante, le photovoltaïque reste une

source d'énergie encore marginale à l'échelle mondiale, ne représentant toujours que moins de 0,1 % de la production énergétique totale. Ce faible pourcentage souligne le potentiel encore largement inexploité de cette technologie dans la transition vers des sources d'énergie renouvelables [10-14].

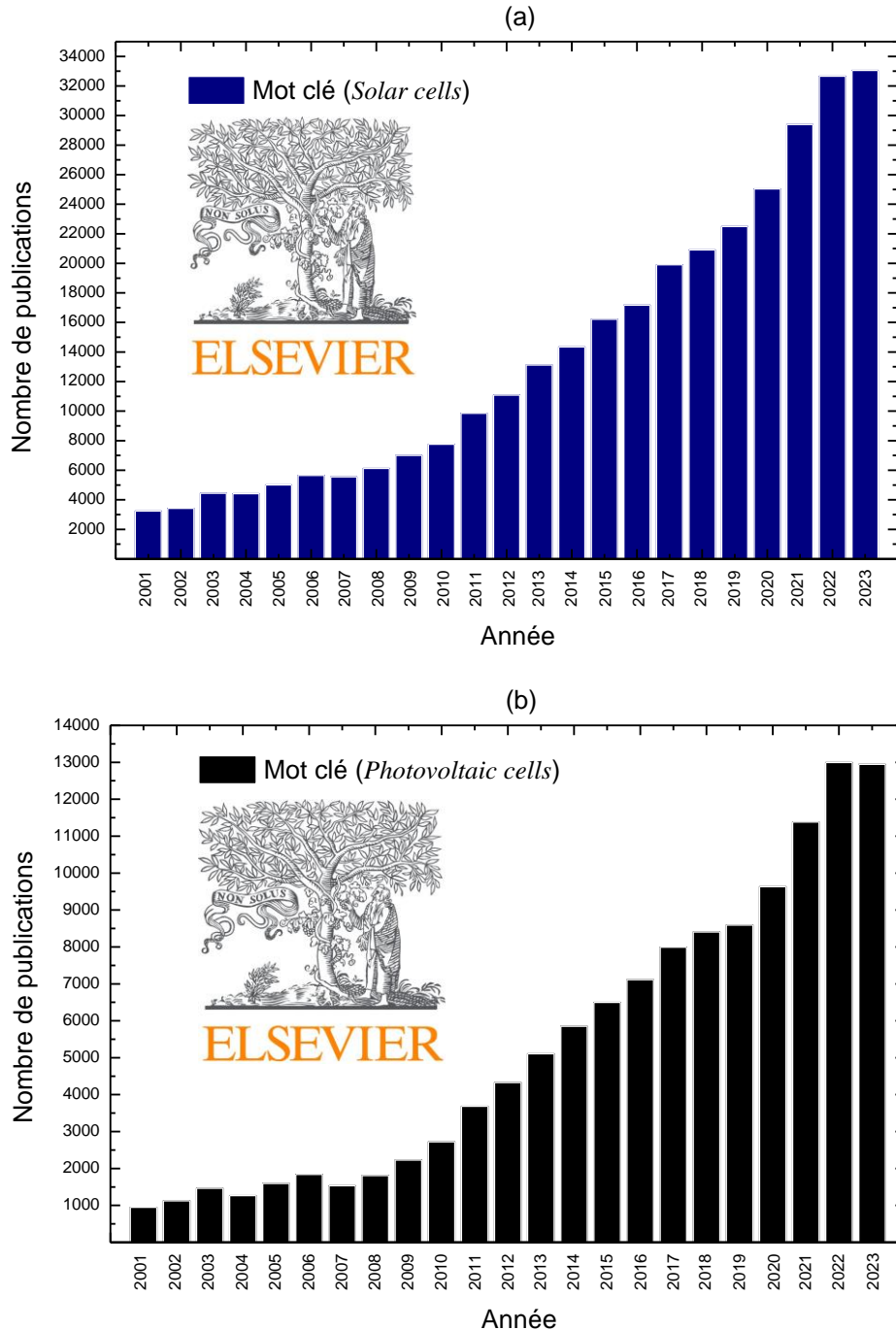


Fig. I.1 Le nombre de publications annuelles entre 2001 et 2023, dans lesquelles les termes (a) « Solar cells » et (b) « Photovoltaic cells » ont été utilisés (les statistiques proviennent par la maison d'édition Elsevier).

Les Figures I.1 (a et b) illustrent le nombre de publications scientifiques par année où les termes « Solar cells » et « Photovoltaic cells » ont été utilisés comme mots-clés. On constate une augmentation significative du nombre d'articles publiés chaque année. De plus, le nombre de publications sur divers types (générations) de cellules solaires a connu une forte croissance au cours des vingt dernières années, notamment celles portant sur les cellules solaires de deuxième génération (cellules en couches minces), comme le montre la Figure I.2. Ces données proviennent d'*Elsevier*. *Elsevier* est une grande maison d'édition spécialisée dans la publication de revues scientifiques, techniques et médicales. Fondée en 1880 aux Pays-Bas, elle est aujourd'hui l'une des plus importantes au monde dans le domaine de la recherche académique.

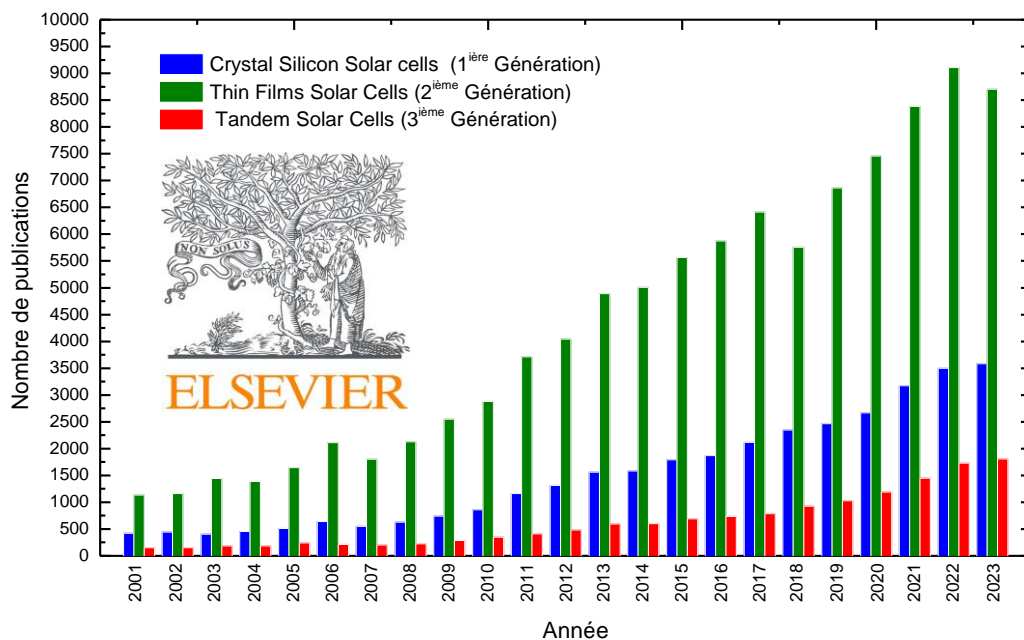


Fig. I.2 Le nombre de publications annuelles sur différents types (générations) de cellules solaires au cours des vingt dernières années (Les statistiques sont issues par la maison d'édition *Elsevier*).

### I.3 Notions sur le spectre solaire et l'air masse

Le Soleil est une étoile à la forme quasi-sphérique, avec un diamètre atteignant 1391 000 km. Il se trouve à une distance moyenne de 149598000 km de la Terre. Principalement composé de gaz, le soleil génère une quantité colossale d'énergie grâce à la fusion nucléaire. Ce processus, où des atomes d'hydrogène se transforment en hélium, permet d'atteindre des températures d'environ 20 millions de degrés Kelvin. L'énergie ainsi produite est émise sous forme de rayonnement, avec des longueurs d'onde comprises entre 0.2  $\mu\text{m}$  (ultraviolet) et 3  $\mu\text{m}$  (infrarouge lointain) [7]. Lorsque le rayonnement solaire traverse l'atmosphère, il subit

une atténuation et une modification de son spectre. La couche d'ozone absorbe une grande partie des rayons ultraviolets, tandis que la vapeur d'eau retient les infrarouges. Ainsi, l'intensité du rayonnement solaire au sol varie en fonction de l'épaisseur atmosphérique traversée par les rayons lumineux, entraînant une répartition inégale sur la surface terrestre. Pour quantifier cette variation, on utilise un coefficient appelé masse atmosphérique ou indice d'air masse ( $AM_x$ ), défini par l'expression :  $x = 1/\sin \theta$ , où  $\theta$  est l'angle d'élévation du Soleil par rapport à l'horizon ( $90^\circ$  lorsque le Soleil est au zénith). Comme illustré à la Figure I.3, lorsque le Soleil est au zénith, la condition AM1 est atteinte, correspondant à une traversée atmosphérique d'une unité (soit environ 7.8 km) [15].

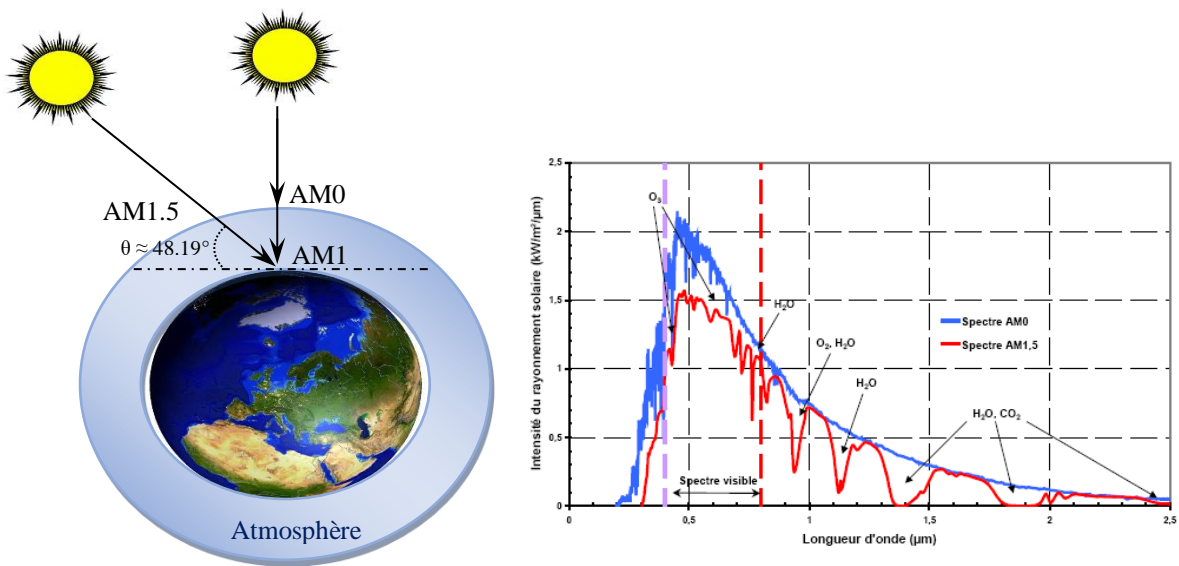


Fig. I.3 Définition de l'indice d'air masse (AM) et du spectre d'émission du rayonnement solaire, approuvé par ; American Society for Testing and Materials (ASTM G173-03) [15, 16].

Lorsque le Soleil forme un angle de  $30^\circ$  avec l'horizon, les conditions AM2 sont applicables. En revanche, en l'absence d'atmosphère, comme à haute altitude, les conditions AM0 sont définies. Le facteur  $x$ , représentant la masse d'air, joue un double rôle : il quantifie d'une part la puissance du rayonnement solaire ( $1353 \text{ W/m}^2$  pour AM0 et  $833 \text{ W/m}^2$  pour AM1.5) et, d'autre part, il sert à établir un spectre de référence. Ce dernier est indispensable pour le calibrage des cellules étalons utilisées dans l'évaluation des performances photovoltaïques. Les conditions standard de qualification des cellules solaires sont définies selon un spectre AM1.5G, qui inclut la lumière diffuse et impose une puissance incidente de  $1000 \text{ W/m}^2$  à une température de  $25^\circ\text{C}$ . Ces paramètres sont essentiels pour garantir des mesures fiables des performances et spécifications des dispositifs photovoltaïques. Ce spectre (Figure I.3) a été validé par l'American Society for Testing and Materials (ASTM

G173-03). Toutes les mesures réalisées dans cette étude ont été effectuées sous les conditions standards AM1.5G [15, 16].

#### I.4. Structure et fonctionnement des cellules photovoltaïques

L'effet photovoltaïque, utilisé dans les cellules solaires, permet de transformer directement l'énergie lumineuse du soleil en électricité. Lorsqu'un photon, issu de la lumière solaire, frappe la surface d'un semi-conducteur (généralement du silicium), il transfère son énergie aux électrons présents dans ce matériau. Ce transfert d'énergie libère les électrons de leurs atomes, générant ainsi des paires électron-trou (les trous représentant des charges positives). Sous l'effet d'un champ électrique interne créé par la jonction entre deux matériaux de types différents (P-N), les électrons libres sont dirigés vers l'électrode négative, tandis que les trous sont attirés vers l'électrode positive. Ce mouvement crée un courant électrique continu. Ce phénomène de génération et de transport des charges dans le semi-conducteur sous l'effet de la lumière est à la base du fonctionnement des cellules photovoltaïques [17].

Une cellule solaire à semi-conducteur (Voir la fig. I.4) est un dispositif composé de deux types de semi-conducteurs aux propriétés de conduction différentes : le type p (où les trous sont les porteurs majoritaires) et le type n (où les électrons sont les porteurs majoritaires). Ce dispositif génère un courant électrique lorsqu'il est exposé à la lumière, qui peut être utilisé dans un circuit externe [8]. Pour ce processus, l'énergie des photons incidents doit d'abord être transférée aux porteurs de charge (électrons ou trous) présents dans le matériau [8]. Ce processus de conversion énergétique se déroule en trois étapes clés : (i) l'absorption des photons du rayonnement solaire par le matériau, (ii) la conversion de l'énergie absorbée en charges électriques libres, et (iii) la collecte de ces charges photogénérées au sein d'un circuit électrique externe [18, 19].

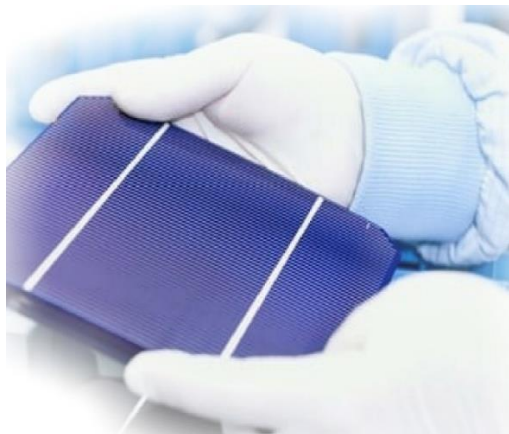


Fig. I.4 Illustration d'une cellule photovoltaïque réelle.

### I.4.1 L'absorption du rayonnement solaire

L'absorption des photons dans un matériau conducteur ou semi-conducteur libre des porteurs de charge libres, un mécanisme appelé photogénération, déterminé par le gap énergétique du matériau. Le gap est l'écart entre le maximum de la bande de valence ( $B_v$ ), remplie d'électrons, et le minimum de la bande de conduction ( $B_c$ ), vide. Il existe deux types de gap [20] : direct et indirect.

- Dans un *gap direct*, les transitions interbandes sont verticales et radiatives, comme dans le GaAs et le MgO (Voir Fig. I.5-a)
- Dans un *gap indirect*, les transitions sont obliques et nécessitent l'intervention d'un phonon, rendant l'absorption moins probable, comme dans le ZnO (Voir Fig. I.5-b)

Lorsque l'énergie du photon incident dépasse celle du gap ( $E_g$ ), un électron peut passer de la  $B_v$  à la  $B_c$ , créant une paire électron-trou, formant un exciton. Ce processus respecte la conservation de l'énergie et du moment [21,22].

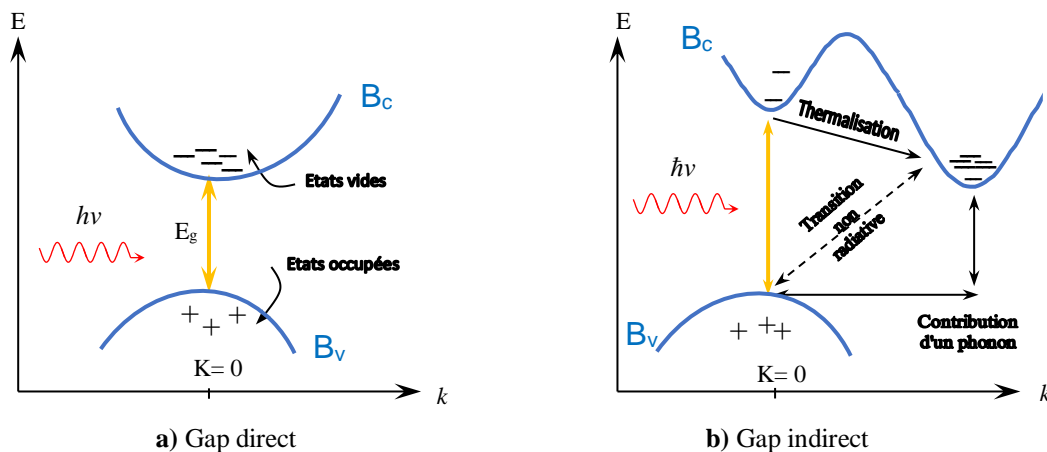


Fig. I.5 Transitions électroniques associées à un gap direct et un gap indirect [20].

### I.4.2 Conversion de l'énergie absorbée en charges électriques libres

Lorsqu'un photon est absorbé, il transfère son énergie aux électrons périphériques des atomes. Si l'énergie du photon est supérieure à celle du gap du matériau, l'électron est libéré de l'attraction de l'atome, créant ainsi un électron libre et un trou, ce dernier agissant comme une charge positive. Ce mouvement d'électrons et de trous génère un courant électrique lorsqu'une charge est connectée. Ce phénomène se produit dans les semi-conducteurs. En revanche, dans les isolants, un gap très large empêche la création de paires électron-trou, comme dans le diamant, ou une structure amorphe piège les porteurs, comme dans le verre. Bien que les diagrammes de bandes (Fig. I.6) montrent ces concepts, ils ne rendent pas

toujours compte de la réalité des isolants amorphes, où les électrons ne respectent pas les schémas de bande classiques. Pour que les électrons passent de la bande de valence à la bande de conduction, il faut fournir une énergie équivalente au gap du matériau. L'énergie excédentaire est convertie en chaleur, ce qui signifie qu'un photon peut produire au maximum une paire électron-trou. Deux phénomènes limitent donc le rendement théorique : l'impossibilité d'utiliser des photons dont l'énergie est inférieure au gap optique, et la perte d'énergie des photons dont l'énergie dépasse le gap [8, 22].

### I.4.3 Collecte des charges photogénérées

Les contacts métalliques, présents sous forme de grille sur la face avant et généralement d'une plaque pleine sur la face arrière, facilitent la collecte des charges vers le circuit extérieur. Cependant, la création de paires électron-trou ne suffit pas, car elles peuvent se recombiner, générant uniquement de l'énergie thermique. Pour éviter cette recombinaison, il est nécessaire de séparer les charges en introduisant un champ électrique dans le matériau. Cela se fait par dopage : une partie du semi-conducteur est dopée avec des atomes ayant un électron de valence supplémentaire, créant un excédent de charges négatives (dopage de type n).

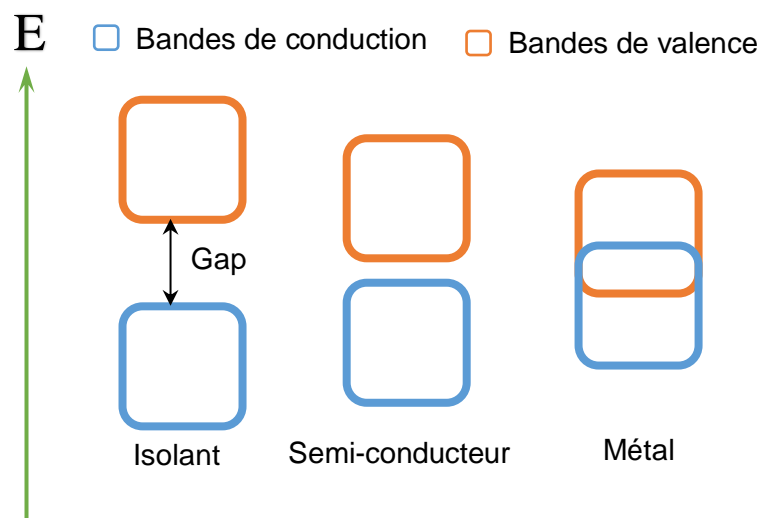


Fig. I.6 Schémas des diagrammes de bandes pour un isolant, un semi-conducteur et un conducteur [8, 20].

Une autre partie est dopée avec des atomes ayant un électron de valence en moins, générant un excédent de charges positives (dopage de type p). Ainsi, la cellule photovoltaïque se compose de deux zones, l'une riche en électrons et l'autre déficitaire. La jonction entre ces deux zones crée une zone de charge d'espace (ZCE), où les porteurs sont séparés. Le contact entre les zones n et p génère un champ électrique : les charges négatives

de la zone n se dirigent vers la zone p, et vice versa pour les charges positives. Cela forme une jonction p-n, avec des types variés de barrières de potentiel (homojonction, hétérojonction, barrière Schottky). Le fonctionnement de la jonction p-n, illustré à la Fig. I.7, montre que les porteurs minoritaires atteignant la ZCE sont dirigés par le champ électrique vers leur zone majoritaire, produisant un photo-courant de diffusion. Les paires électron-trou générées par les photons incidents sont également dissociées par ce champ, entraînant un photocourant de génération. Les deux contributions se combinent pour former le photocourant résultant ( $I_{ph}$ ), qui est proportionnel à l'intensité lumineuse [22-24].

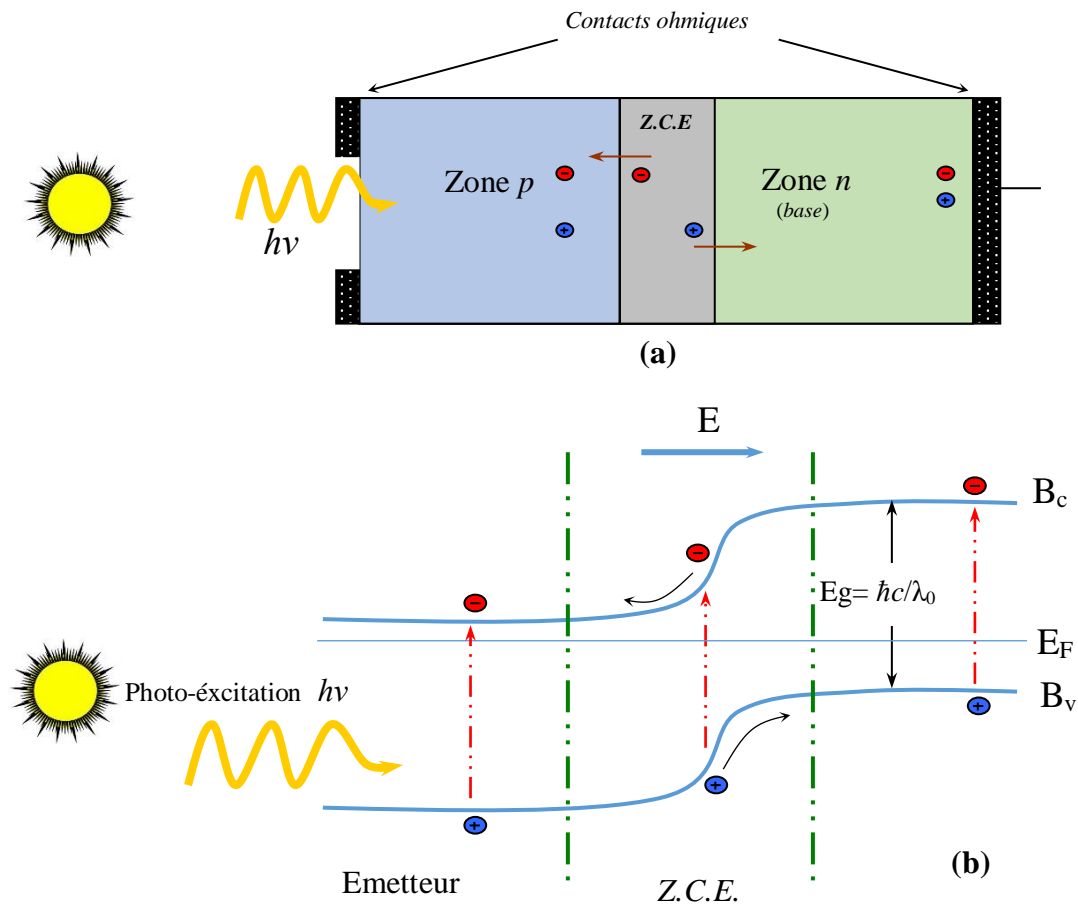


Fig. I.7 Structure (a) et diagramme énergétique de bande (b) d'une cellule solaire photovoltaïque (jonction pn) [22, 24].

### I.5. Paramètres physiques et schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque

La cellule photovoltaïque repose sur une jonction P-N où l'éclairement génère des porteurs de charge, produisant de l'énergie électrique. Son fonctionnement dépend de la polarisation : en régime passant, les porteurs majoritaires traversent la jonction, générant un courant ; en régime bloqué, seuls les porteurs minoritaires contribuent au courant, appelé

courant de saturation  $I_0$ . Après avoir rappelé les principes physiques de la cellule photovoltaïque, cette section aborde ses principales caractéristiques électriques.

### I.5.1 La courbe courant-tension (J-V)

Une cellule solaire est essentiellement une photodiode qui fonctionne sans polarisation extérieure et délivre son photocourant à une charge connectée. Cette cellule est caractérisée par une courbe courant-tension (J-V) qui diffère selon qu'elle est dans le noir (sous l'obscurité) ou sous illumination. La Figure I.8 illustre une caractéristique typique d'une cellule photovoltaïque dans ces deux conditions : *Sous l'obscurité*, la cellule ne génère aucun courant, car elle ne reçoit pas de lumière, le dispositif se comporte alors comme un élément passif, et la courbe J(V) est celle d'une diode classique sans contribution du photocourant. *Sous illumination*, la situation change considérablement, la caractéristique J(V) se déplace de telle sorte qu'elle ne passe plus par l'origine du repère. Une région apparaît où le produit  $J \times V$  est négatif, ce qui signifie que la cellule génère à la fois du courant et de l'énergie électrique, convertissant ainsi l'énergie lumineuse en énergie électrique [25-28].

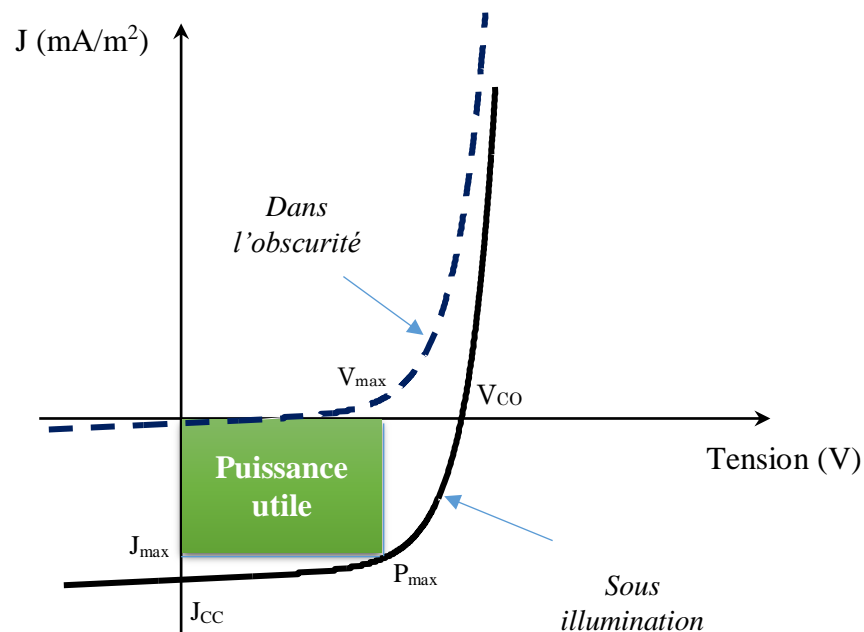


Fig. I.8 Caractéristique J-V dans l'obscurité et sous éclairage d'une cellule photovoltaïque [14].

#### I.5.1.1. Caractéristiques (J-V) sous obscurité

Dans l'obscurité, la caractéristique courant-tension J(V) d'une jonction P-N suit celle d'une diode idéale, et son comportement est décrit par l'équation (I.1) [29] :

$$J_{obs} = J_0 \left( \exp\left(\frac{qV}{nKT}\right) - 1 \right) \quad (I.1)$$

$$\text{Ou par :} \quad I_{obs} = I_0 \left( \exp \left( \frac{qV}{nKT} \right) - 1 \right) \quad (\text{I. 2})$$

Où  $J_0$  représente la densité de courant de saturation,  $n$  est le facteur d'idéalité de la diode (compris entre 1 et 2),  $K$  la constante de Boltzmann ( $1.381 \times 10^{-23}$  J/K),  $T$  la température en kelvins, et  $q$  la charge élémentaire de l'électron [29].

### I.5.1.2. Caractéristiques (J-V) sous illumination

Sous éclairage, les paires électron-trou photogénérées dans la zone de charge d'espace (ZCE) sont instantanément séparées par le champ électrique  $E$  régnant dans cette région. Les trous (charges positives) sont accélérés vers la zone P, tandis que les électrons (charges négatives) se dirigent vers la zone N. Ces porteurs deviennent alors majoritaires dans leur région respective, générant ainsi le photocourant de génération. Par ailleurs, les porteurs minoritaires, à savoir les trous générés dans la région N et les électrons générés dans la région P, induisent un gradient de concentration et diffusent à travers le matériau. S'ils parviennent à atteindre la ZCE sans se recombiner, le champ électrique les transporte à travers cette zone déplétée, leur permettant d'atteindre la région où ils deviennent majoritaires. Ce processus génère le *photocourant de diffusion*. Enfin, la présence de contacts ohmiques garantit la collecte efficace des porteurs de charge, donnant lieu à la création d'un courant photogénéré  $I_{ph}$ , qui correspond à la somme des deux contributions précédentes. Ce courant contribue au courant total selon la relation [6, 27] :

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

Le comportement statique d'une cellule solaire peut être modélisé à partir de l'équation décrivant la jonction PN d'une diode classique. Cette équation intègre le courant de court-circuit ainsi que les résistances représentant les pertes liées aux connexions. Par conséquent, le fonctionnement statique d'une cellule photovoltaïque à base de silicium, constituée d'une jonction P-N, est décrit par l'équation suivante [25] :

$$I = I_{CC} - I_{obs} = I_{CC} - I_0 \left( \exp \left( \frac{q(V+IR_s)}{nKT} \right) - 1 \right) - \frac{V+IR_s}{R_{sh}} \quad (\text{I. 4})$$

Dans une cellule solaire, deux courants agissent en opposition : le courant d'éclairage et le courant d'obscurité. En obscurité, la caractéristique électrique de la cellule correspond

à celle d'une diode, tandis que sous éclairage, elle adopte l'allure illustrée dans la Fig. I.8. La densité de courant utile à collecter, notée  $J$ , correspond au courant d'éclairage. La courbe J-V (Fig.I.8) permet de déterminer les principaux paramètres électriques de la cellule [25]:

- $V_{CO}$  : Tension de circuit ouvert.
- $J_{CC}$  : Densité de courant de court-circuit.
- $J_{max}$ : Densité de courant au point de puissance maximale.
- $V_{max}$  : Tension au point de puissance maximale.
- $P_{max}$  : Puissance maximale délivrée.

Une cellule solaire ne fonctionne pas comme un générateur classique. Sa courbe J-V est fixée pour une irradiance et une température données, mais ni le courant ni la tension ne sont imposés ; le point de fonctionnement dépend de la charge  $R$ . La puissance maximale  $P_{max}$  est atteinte lorsque le produit  $V \times J$  est maximal, ce qui correspond à la surface du plus grand rectangle inscrit sous la courbe  $J(V)$  (Fig. I.8). Pour optimiser la production énergétique,  $R$  doit être adapté à cette condition.

**La puissance maximale  $P_{max}$**  délivrée par une cellule solaire est atteinte lorsque le produit  $V \times J$  est maximal. Les valeurs  $V_{max}$  et  $J_{max}$  correspondent respectivement à la tension et à la densité de courant à ce point. Graphiquement,  $P_{max}$  représente la surface du plus grand rectangle, de dimensions  $V_{max}$  et  $J_{max}$ , pouvant être inscrit sous la courbe  $J(V)$  (Fig. I.8) [30].

$$P_{max} = (JV)_{max} = V_{max} \times J_{max} \quad (I.5)$$

**La densité de courant de court-circuit  $J_{CC}$**  représente la densité de courant maximale délivrée par une cellule photovoltaïque lorsque ses électrodes sont en court-circuit. Ce courant, généré par les porteurs minoritaires drainés par le champ interne, est limité par l'absorption optique, la réflectivité, les couches d'encapsulation, et la longueur de diffusion des porteurs. À spectre donné,  $J_{CC}$  dépend également de l'irradiance du rayonnement incident [7]. Il s'agit du courant mesuré aux bornes de la cellule lorsque la tension est nulle ( $V=0$ ), ce qui correspond au courant maximal qu'une cellule peut délivrer dans ces conditions. Ce courant de court-circuit  $J_{CC}$  est principalement constitué des porteurs minoritaires générés par l'irradiation, et sa valeur typique se situe autour de plusieurs milliampères par centimètre carré de cellule. En raison de la faible résistance série  $R_s$  par rapport à la résistance parallèle  $R_{sh}$ , on peut approximativement considérer que  $J_{CC} \approx J_{ph}$  où

$J_{ph}$  est le courant photogénéré. Ce courant est directement lié à l'irradiance et aux propriétés optiques du matériau, ainsi qu'à la surface active de la cellule [8, 29].

**La tension de circuit ouvert  $V_{CO}$**  correspond à la tension mesurée aux bornes de la cellule lorsque le courant est nul. Elle représente la tension maximale qu'une cellule peut fournir, et pour une cellule en silicium, elle est généralement d'environ 0.6 V. En utilisant l'équation (I.4) avec  $I=0$  et en définissant  $V_T=KT/q$  comme le potentiel thermique, l'expression de  $V_{CO}$  s'obtient comme suit [31] :

$$V_{CO} = \frac{KT}{q} \ln \left( \frac{I_{CC}}{I_0} + 1 \right) = V_T \ln \left( \frac{I_{CC}}{I_0} + 1 \right) \quad (I.6)$$

**Le facteur de forme (FF)**, ou « Fill-Factor » en anglais, est un paramètre clé utilisé pour évaluer la qualité d'une cellule ou d'un générateur photovoltaïque à partir de sa caractéristique  $I(V)$ . Il représente le rapport entre la puissance maximale délivrée par la cellule  $P_{max}$  et la puissance théorique idéale définie par le produit  $I_{CC} \times V_{CO}$ . Ce coefficient, généralement autour de 0.7 pour des cellules performantes, diminue avec l'augmentation de la température. Le FF reflète également l'écart entre la puissance réelle et la puissance idéale, cet écart étant souvent limité par des résistances parasites. L'expression exacte du FF est définie par la relation suivante (I.6) [7, 8, 32] :

$$FF = \frac{P_{max}}{I_{CC} \times V_{CO}} = \frac{I_{max} \times V_{max}}{I_{CC} \times V_{CO}} \quad (I.7)$$

**Le rendement d'une cellule solaire ( $\eta$ )**, ou rendement de conversion, est le paramètre de référence pour évaluer sa performance. Il représente la fraction de l'énergie lumineuse convertie en énergie électrique et se calcule comme le rapport entre la puissance maximale délivrée  $P_{max}$  et la puissance du rayonnement incident. Ce rendement dépend de la fraction du rayonnement absorbée par le matériau semi-conducteur et des paramètres extraits de la courbe  $J-V$  sous éclairage. L'expression de  $\eta$  est donnée par la relation (I.8) [7, 8, 33] :

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_{in}} = \frac{I_{max} \times V_{max}}{P_{in}} = \frac{V_{CO} \times I_{CC} \times FF}{E \times S} \quad (I.8)$$

$P_{in}$  représente la puissance d'entrée, correspondant à l'éclairage incident sur la cellule photovoltaïque par unité de surface. Il s'agit de l'énergie lumineuse  $E$  du soleil, sous forme

de photons, reçue par unité de surface (standardisée à  $1000 \text{ W/m}^2$  dans les conditions normales).  $S$  désigne la surface de la cellule [33].

Le rendement, principal paramètre pour comparer les performances des cellules solaires, est défini comme le rapport entre la puissance fournie ( $J_{CC} \times V_{CO} \times FF$ ) et la puissance incidente. Il dépend du spectre solaire, de l'intensité lumineuse et de la température de la cellule. Pour standardiser les comparaisons, les mesures des cellules terrestres s'effectuent sous un rayonnement AM1.5G à  $25 \text{ }^\circ\text{C}$ , correspondant à une puissance incidente normalisée de  $1 \text{ kW/m}^2$ , prenant en compte les radiations directes et diffuses [23].

### I.5.2 Rendement quantique et réponse spectrale

Lorsque des photons ayant une énergie supérieure au *gap* (ou bande interdite) du semi-conducteur d'une cellule photovoltaïque frappent la surface, ils peuvent générer une *paire électron-trou*. Cette génération est un processus fondamental pour la conversion de l'énergie lumineuse en énergie électrique. Si l'énergie d'un photon est supérieure à la bande interdite du matériau, l'excédent d'énergie (la différence entre l'énergie du photon et la bande interdite) sera généralement perdue sous forme de chaleur, ce qui réduit l'efficacité de la conversion. La capacité d'une cellule solaire à générer des paires électron-trou dépend fortement de la *longueur d'onde* du rayonnement incident. En effet, les photons de différentes longueurs d'onde apportent différentes quantités d'énergie, et les matériaux semi-conducteurs sont sensibles à des plages spécifiques de longueurs d'onde [22].

#### I.5.2.1 Réponse spectrale

La réponse spectrale d'une cellule photovoltaïque est une caractéristique importante. Elle est définie comme le rapport du courant généré par la cellule au courant qu'elle pourrait générer pour chaque longueur d'onde spécifique du spectre lumineux incident. Cela permet de comprendre comment la cellule réagit à différentes longueurs d'onde de la lumière et, par conséquent, d'identifier quelles plages de longueurs d'onde contribuent le plus à la génération de courant. Elle renseigne sur l'efficacité de la cellule à convertir la lumière incidente en courant électrique en fonction de la longueur d'onde. La réponse spectrale est donc directement liée à la capacité de la cellule à exploiter les différentes parties du spectre lumineux [32, 34].

La réponse spectrale  $SR$  est exprimée par la relation suivante [29] :

$$SR(\lambda) = \frac{q\lambda}{hc} \times EQE \approx 0.808 \times \lambda \times EQE \quad (\text{I. 9})$$

### I.5.2.2 Rendement Quantique Externe (EQE) (Rendement quantique)

Le rendement quantique externe (EQE) est une mesure clé pour évaluer l'efficacité d'une cellule photovoltaïque. Il est défini comme le rapport du nombre de porteurs de charge (électrons et trous) générés par la cellule au nombre de photons incidents, représentant ainsi l'efficacité avec laquelle les photons sont convertis en porteurs de charge. Le rendement quantique donne la probabilité qu'un photon incident, d'énergie  $E$ , génère un électron dans le circuit externe, ce qui en fait un paramètre à la fois quantitatif et qualitatif dans la description de la cellule photovoltaïque (PV). L'EQE permet de mesurer le nombre d'électrons générés à la sortie de la cellule par rapport au nombre de photons incidents. Il est également utilisé pour quantifier les pertes dans la cellule PV, telles que celles dues à la réflexion de la lumière à la surface, ce qui entraîne des pertes de photons, tant de faible que de forte énergie. L'expression de l'EQE est donnée par la relation suivante [7, 35]:

$$EQE(\lambda) = \frac{\text{Nombre de porteurs générés}}{\text{Nombre de photons incidents}} = \frac{J_{ph}(\lambda)}{q\Phi(\lambda)} \quad (I.10)$$

Où :

- $J_{ph}(\lambda)$  : est le courant photocourant généré à la longueur d'onde  $\lambda$  (en A),
- $q$  : est la charge élémentaire ( $q=1.602 \times 10^{-19}$  C)
- $\Phi(\lambda)$  : est le flux de photons incident à la longueur d'onde  $\lambda$  (en photons/s·cm<sup>2</sup>).

Cette expression permet de quantifier la capacité d'une cellule photovoltaïque à convertir les photons en électrons, et donc son efficacité globale.

Lorsque l'EQE est égal à 1, cela signifie que chaque photon incident génère une paire électron-trou. Cependant, dans la réalité, l'EQE est souvent inférieur à 1 en raison de divers facteurs tels que la *réflectivité de la surface* de la cellule, la *recombinaison* des porteurs et l'incapacité à absorber certaines longueurs d'onde.

### I.5.2.3 Rendement Quantique Interne (IQE)

Le rendement quantique interne (IQE) est lié à l'EQE, mais il prend également en compte la réflectivité de la cellule et les pertes de photons avant qu'ils n'atteignent la couche active de la cellule (ou après leur génération). L'IQE représente donc l'efficacité de la génération de paires électron-trou dans la cellule elle-même, sans tenir compte de la lumière qui est perdue par réflexion à la surface de la cellule. Mathématiquement, l'IQE peut être exprimé en fonction de l'EQE et de la réflectivité  $R$  de la cellule comme suit [36]:

$$IQE(\lambda) = \frac{\text{Nombre de porteurs générés}}{\text{Nombre de photons absorbés}} = \frac{EQE}{1-R} \quad (I.11)$$

Cela montre que l'IQE dépend non seulement de l'efficacité de génération des porteurs, mais aussi de la capacité de la cellule à capturer la lumière incidente (c'est-à-dire la réduction de la réflectivité de la surface).

En effet, la *réponse spectrale* d'une cellule photovoltaïque donne une indication détaillée de la capacité de la cellule à générer un photocourant en fonction des différentes longueurs d'onde du rayonnement incident. Les *rendements quantiques externes (EQE)* et *internes (IQE)* permettent de quantifier l'efficacité de cette conversion, en tenant compte des pertes de photons dues à la réflexion et d'autres phénomènes internes. Ces paramètres sont essentiels pour optimiser les performances des cellules photovoltaïques et maximiser la conversion de l'énergie solaire en énergie électrique.

### **I.5.3 Schéma équivalent en circuits d'une cellule photovoltaïque**

La modélisation électrique d'une cellule photovoltaïque présente trois avantages clés, chacun jouant un rôle crucial dans l'optimisation et la compréhension du système photovoltaïque [7, 22] :

#### **(i) Facilité d'utilisation grâce au circuit électrique équivalent :**

Le circuit électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque simplifie la représentation du comportement de la cellule en termes de composants électriques bien connus, tels que des résistances, des sources de courant et de tension. Cette simplification permet aux ingénieurs et chercheurs de travailler plus facilement avec des modèles mathématiques et d'effectuer des simulations sans avoir à se plonger dans les détails complexes du processus physique sous-jacent. Par exemple, la cellule est souvent modélisée par une source de courant idéale, une résistance série et une résistance parallèle, ce qui permet de comprendre rapidement les effets de l'irradiation, de la température et des autres paramètres.

#### **(ii) Vulgarisation des propriétés du système :**

Le modèle électrique facilite la vulgarisation des principes physiques et des propriétés d'une cellule photovoltaïque pour un public non spécialiste. Par exemple, un modèle simplifié montre comment la lumière incidente est convertie en électricité et comment les différentes caractéristiques, telles que la courbe I-V (courant-tension), dépendent des conditions externes. Ce type de représentation permet de rendre les phénomènes comme la recombinaison des porteurs de charge, la conversion photonique et l'impact de la température, plus accessibles pour les étudiants, les décideurs ou les personnes intéressées par les technologies photovoltaïques sans nécessiter de connaissances approfondies en physique ou en électronique.

**(iii) Facilitation de la compréhension des phénomènes complexes :**

Grâce à la modélisation électrique, il est plus facile de comprendre des phénomènes physiques complexes, tels que les effets de l'ombrage, les pertes de chaleur, la recombinaison des porteurs de charge ou encore les variations de performance dues à des facteurs externes. Les modèles électriques permettent de simuler et d'analyser la réponse du système à différents environnements, ce qui aide à optimiser la conception et à prédire le rendement d'un panneau photovoltaïque. Cela permet également de mieux comprendre comment les différentes parties du circuit, telles que les diodes ou les résistances, influencent le  $\eta_{\text{globale}}$ .

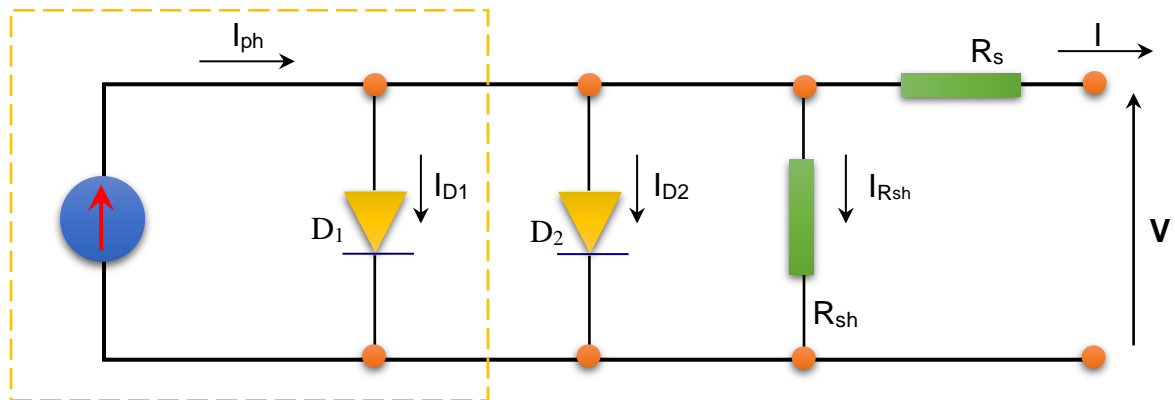


Fig. I.9 Schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque : modèle à deux diodes [22].

Dans le cas où une cellule photovoltaïque se comporte comme un générateur de puissance, elle peut être modélisée à l'aide de circuits équivalents qui reproduisent son comportement en termes de composants électroniques. Ces modèles sont essentiels pour comprendre et prédire les performances de la cellule sous différentes conditions d'irradiation, de température et de charge.

Les circuits équivalents les plus couramment utilisés dans la littérature pour modéliser les cellules photovoltaïques à jonction P-N sont les modèles à une diode et à deux diodes. Chacun de ces modèles a des caractéristiques spécifiques qui les rendent adaptés à différentes situations.

**I.5.3.1 Modèle à une diode**

Le modèle à une diode est le modèle le plus simple et est souvent utilisé pour les simulations de base. Il représente la cellule photovoltaïque avec une source de courant idéale (représentant le courant généré par la cellule) et une diode qui modélise les phénomènes de recombinaison dans la jonction P-N. Ce modèle inclut aussi une résistance série (qui représente les pertes dues aux matériaux conducteurs et aux contacts) et une résistance parallèle (qui représente les pertes par fuite de courant ou courant inverse). Le courant généré

$I_{ph}$  est modélisé par l'équation (I.4). Ce modèle est efficace pour des simulations de base dans des conditions standards, mais il peut être insuffisant lorsque des effets plus complexes, comme les pertes supplémentaires ou les comportements non idéaux, sont significatifs [35].

### I.5.3.2 Modèle à deux diodes

Le modèle à deux diodes est plus précis et est utilisé pour modéliser des effets plus complexes de la cellule photovoltaïque. En plus de la diode principale, qui modélise la recombinaison des porteurs de charge, une deuxième diode est ajoutée pour prendre en compte d'autres phénomènes de recombinaison ou de fuite de courant dans la cellule. Ce modèle est particulièrement utile pour les cellules qui ne se comportent pas idéalement, par exemple celles présentant des pertes accrues ou des caractéristiques de courant-tension qui ne peuvent pas être bien décrites par un modèle à une seule diode. Le modèle à deux diodes inclut généralement aussi une résistance série et une résistance parallèle, tout comme le modèle à une diode [36].

On déduit de l'analyse du schéma présenté dans la Fig. I.9 l'équation qui décrit l'évolution du courant en fonction de la tension, en appliquant les lois de Kirchhoff [7].

$$I = I_{ph} - I_{D1} - I_{D2} - I_{R_{sh}} \quad (I.12)$$

$$I = I_{ph} - I_{01} \left( \exp\left(\frac{q(V+IR_s)}{n_1KT}\right) - 1 \right) - I_{02} \left( \exp\left(\frac{q(V+IR_s)}{n_2KT}\right) - 1 \right) - \frac{V+IR_s}{R_{sh}} \quad (I.13)$$

$I_{01}$  représente le courant de saturation de la première diode, lié à la diffusion (voir la section A de ce chapitre), tandis que  $I_{02}$  correspond au courant de saturation de la deuxième diode, associé aux recombinaisons. Les facteurs d'idéalité des deux diodes sont respectivement  $n_1$  et  $n_2$ .

Le facteur d'idéalité de la diode responsable des recombinaisons peut varier considérablement d'une cellule à l'autre, ce qui reflète des taux de recombinaison plus ou moins élevés en fonction du matériau et de sa qualité. Contrairement à ce modèle, le modèle à une diode ne distingue pas entre diffusion et recombinaison, et regroupe ces deux phénomènes dans une seule diode. Les résistances  $R_s$  et  $R_{sh}$  tiennent compte des pertes dissipatives dans la cellule.  $R_s$  est liée aux résistances intrinsèques du matériau, de la jonction, ainsi que des contacts avant et arrière. En revanche,  $R_{sh}$  prend en compte les courants de fuite générés par des impuretés métalliques dans la jonction ou des défauts dans le réseau cristallin. La connaissance de ces résistances parasites est cruciale pour évaluer la

qualité du matériau et pour optimiser le rendement de la cellule. En effet, le facteur de forme dépend directement de ces résistances : plus  $R_{sh}$  est élevé, moins il y a de courants de fuite, ce qui améliore le facteur de forme ; et plus  $R_s$  est faible, moins les pertes résistives sont importantes aux interfaces métalliques ou à la surface du semi-conducteur, ce qui, là encore, améliore le facteur de forme [22].

## I.6 Les générations des cellules solaires photovoltaïques

Au cours des dernières décennies, des progrès significatifs ont été réalisés dans la conception des cellules photovoltaïques, tant au niveau des matériaux utilisés que des procédés de fabrication. Ces avancées ont permis d'améliorer l'efficacité de conversion de l'énergie solaire, atteignant des records historiques. Toutefois, malgré ces progrès, les défis restent nombreux, notamment en ce qui concerne la conversion énergétique, les coûts de production et le stockage de l'énergie. C'est pourquoi de nombreuses recherches sont en cours pour surmonter ces limitations et pour explorer de nouveaux matériaux semi-conducteurs. Aujourd'hui, on distingue trois générations de cellules photovoltaïques, chacune marquée par des innovations technologiques :

### II.6.1 Cellules de 1<sup>ère</sup> génération : Cellules cristallines

Les cellules photovoltaïques de première génération, qui dominent largement le marché avec environ 80 % de part, sont principalement constituées de silicium cristallin, utilisé sous forme de monocristaux ou de polycristaux. Ces cellules, reposant sur une unique jonction p-n, sont produites à partir de silicium ultra-pur, un matériau obtenu par fusion et refroidissement contrôlé. Bien que leur rendement théorique maximal atteigne environ 27 % et que les modèles les plus récents s'en rapprochent progressivement, leur fabrication reste énergivore et coûteuse en raison des procédés complexes et des matériaux de haute pureté requis [37].

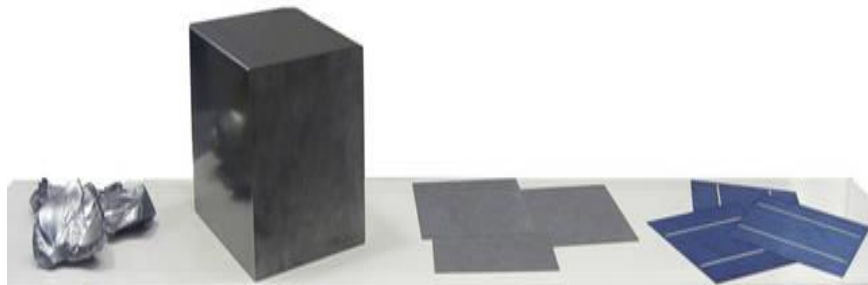


Fig. I.10 Méthode de fabrication : le silicium en fusion est refroidi dans des creusets parallélépipédiques pour former un cristal, qui est ensuite découpé en fines tranches, appelées "wafers". Les cellules PV sont fabriquées à partir de ces wafers, après un processus de dopage et de traitement de surface [37].

### **I.6.1.1 Cellules en silicium monocristallin (c-Si)**

Les cellules photovoltaïques monocristallines sont fabriquées à partir d'un seul cristal de silicium très pur, obtenu par un processus de refroidissement contrôlé et progressif. Elles offrent un rendement élevé, allant de 15 à 19 % en production industrielle et jusqu'à 25 % en laboratoire, avec une puissance typique de 170 à 200 Wc/m<sup>2</sup>. Leur sensibilité accrue aux rayonnements directs en fait une option performante sous un bon ensoleillement, mais leur coût de production reste élevé en raison de la pureté requise du silicium et de la complexité de leur fabrication. Actuellement, les cellules "Al-BSF" dominent le marché, mais les technologies émergentes, comme les cellules "PERC" (passivated emitter and rear cell), visent un rendement de ± 23 %, tandis que les cellules à hétérojonctions promettent jusqu'à 26.6 % (déjà atteint en laboratoire). Bien qu'elles présentent un très bon rendement global, leur coût élevé et leur faible performance sous faible éclairage constituent leurs principaux inconvénients [37,38].

### **I.6.1.2 Cellules en silicium polycristallin (p-Si)**

Les cellules photovoltaïques polycristallines, fabriquées à partir de multiples cristaux de silicium, se distinguent par leur coût de production réduit par rapport aux cellules monocristallines, grâce à un procédé moins exigeant en pureté. Elles offrent un rendement industriel de 12 à 16 %, pouvant atteindre 20 % en laboratoire, avec des performances typiques de 16 à 18 %, soit une puissance de 160 à 180 Wc/m<sup>2</sup>. Ces cellules, moins efficaces que leurs homologues monocristallins, sont néanmoins les plus utilisées en raison de leur excellent rapport performance/prix. Elles présentent une bonne sensibilité aux rayonnements directs, mais leur forte sensibilité à la température et leur rendement limité sous faible éclairage constituent leurs principaux inconvénients [37,38].

### **I.6.1.3 Cellules en silicium microcristallin (μc-Si)**

L'Institut de microtechnique de l'École polytechnique fédérale de Lausanne L'EPFL a établi un nouveau record d'efficacité de 10.7% pour une cellule solaire en silicium à couches minces, surpassant le précédent record de 1998. Ces cellules utilisent seulement 1.8 micromètre de silicium, soit 100 fois moins que les technologies classiques. Bien que cette efficacité soit inférieure aux modules traditionnels (15-20%), elle permet d'économiser les matières premières et offre un retour énergétique rapide, avec une récupération de l'énergie en moins d'un an dans les régions ensoleillées. Cette avancée a été validée indépendamment par l'Institut Fraunhofer en Allemagne [39, 40].

### **I.6.2 Cellules de 2<sup>ème</sup> génération : Cellules en couches minces (Thin films)**

La deuxième génération de cellules photovoltaïques, basée sur les couches minces, représentait moins de 6 % de la production d'électricité photovoltaïque en 2019 [41]. Dominée à plus de 97 % par les technologies au tellurure de cadmium (CdTe) et au CIGS (cuivre, indium, gallium, sélénium), cette génération utilise des couches minces de matériaux semi-conducteurs déposées sur des substrats flexibles, comme le verre ou le plastique. Ces cellules offrent des avantages tels que des coûts de production réduits et une plus grande flexibilité, bien que leur rendement reste inférieur à celui des cellules cristallines. Généralement ces cellules PV comprennent des technologies comme l'a-Si, le CdTe et le CIGS, fréquemment utilisées dans des dispositifs solaires tels que les montres et les calculatrices [42].

#### **I.6.2.1 Cellules à base de silicium amorphe (a-Si)**

Le silicium amorphe (a-Si) figure parmi les matériaux utilisés dans cette génération de cellules photovoltaïques, reconnues pour leur faible coût de production grâce à une consommation réduite de matériau semi-conducteur et leur impact environnemental moindre, évitant l'étape énergivore de fabrication des wafers de silicium. Avec un rendement industriel de 6 à 8 % (60-70 Wc/m<sup>2</sup>) et atteignant 13.4 % en laboratoire, ces cellules fonctionnent efficacement sous faible éclairage et sont moins sensibles aux températures élevées. Elles permettent également la fabrication de panneaux souples, légers et flexibles, souvent utilisés dans des applications à petite échelle comme les calculatrices et montres solaires. Cependant, elles présentent des limites, notamment un rendement global inférieur à celui d'autres technologies, une efficacité réduite sous éclairage direct et une dégradation des performances plus rapide avec le temps [22,37].

#### **I.6.2.2 Cellules à base de diséléniure de cadmium (CdTe)**

La technologie basée sur le tellurure de cadmium (CdTe) offre des rendements inférieurs à ceux des cellules cristallines, variant de 7 à 9 % en production industrielle, avec un record de 21,0 % en laboratoire. Elle se distingue par un faible coût de production, une excellente capacité d'absorption de la lumière et un coefficient thermique avantageux, la rendant presque parfaitement adaptée au spectre solaire. Toutefois, cette technologie est limitée par la rareté naturelle du tellurium, ce qui impose une réduction maximale de l'épaisseur de la couche d'absorption, actuellement d'environ 3 µm. Un autre inconvénient majeur est la toxicité du cadmium, bien que ce dernier soit dangereux principalement lors de la fabrication, un module photovoltaïque contenant très peu de cadmium (environ 2 g pour un module CdTe de 60 W, pesant ~12 kg). La structure de ces cellules repose sur une couche

d'absorption en CdTe déposée sur un substrat en verre, associée à d'autres couches de jonction, puis scellée hermétiquement par une plaque de verre. Étant donné qu'il est impossible de créer une jonction p-n sur le CdTe, une hétérojonction est formée en déposant une fine couche de sulfure de cadmium (CdS de type n), un semi-conducteur faiblement absorbant [22, 39].

### **I.6.2.3 Cellules à base de diséléniure de cuivre, d'indium et de gallium (CIGS)**

Les cellules CIGS (cuivre, indium, gallium, sélénium) sont fabriquées à partir de matériaux peu coûteux et offrent un rendement élevé parmi les technologies à couches minces, atteignant jusqu'à 21 % en laboratoire. Elles présentent une grande stabilité, un excellent coefficient d'absorption de la lumière et une bonne performance par rapport aux autres technologies photovoltaïques à couches minces, avec un rendement commercial de 13 %. Toutefois, la disponibilité limitée de l'indium, une ressource rare, et le recours au cadmium, un matériau toxique nécessaire pour former la jonction p-n, représentent des défis importants pour leur développement à grande échelle. La recherche se concentre ainsi sur la réduction de l'épaisseur de ces cellules (actuellement autour de 2  $\mu\text{m}$ ) et l'amélioration de leurs propriétés, notamment en ajoutant du gallium dans la variante CIGS pour optimiser l'absorption lumineuse [7, 22].

Les cellules de deuxième génération présentent plusieurs avantages et inconvénients. Parmi les avantages, on note une sensibilité accrue aux rayonnements diffus, une moindre sensibilité à l'ombrage grâce à la forme longitudinale des cellules, une utilisation réduite de matériaux de base, une meilleure résistance aux fortes températures, ainsi que la possibilité de fabriquer des panneaux souples, flexibles et semi-transparents. En revanche, elles présentent des inconvénients, tels que la toxicité de certains matériaux comme le cadmium lors de la fabrication, une dégradation de la performance au fil du temps, un rendement inférieur à celui des cellules de première génération, et la rareté de certains matériaux utilisés. En particulier, le diséléniure de cuivre, qui est déjà en production industrielle, offre un rendement de 13 % pour certains modules commerciaux et jusqu'à 21 % pour les cellules en laboratoire. Les modules commerciaux ne posent pas de problème de toxicité du cadmium, et les réductions de coût attendues pour cette technologie à moyen terme sont donc prometteuses [38, 39].

### **I.6.3 Cellules de 3<sup>ème</sup> génération : Cellules à haute performance**

Les cellules de troisième génération, qui incluent des technologies basées sur des macromolécules et des nanoparticules, se caractérisent par des procédés de fabrication moins consommateurs d'énergie et potentiellement moins coûteux. Cependant, elles souffrent d'un

manque de stabilité dans le temps, limitant leur durée de vie lorsqu'elles sont exposées au soleil, ce qui restreint leur utilisation dans les applications photovoltaïques [7].

### **I.6.3.1 Cellules à multijonctions**

Les cellules à multijonctions, conçues pour atteindre des rendements très élevés, peuvent dépasser 40 % en laboratoire, avec une limite théorique de 81 %. Elles fonctionnent grâce à la superposition de multiples cellules, chacune captant une bande spécifique d'énergie solaire, ce qui maximise leur efficacité. Toutefois, leur coût de fabrication élevé restreint leur utilisation à des domaines spécialisés, comme l'industrie spatiale ou le solaire à concentration. Ces cellules représentent une avancée technologique majeure pour des applications nécessitant un rendement optimal [22,38].

### **I.3.6.2 Cellules hybrides**

Les cellules hybrides, combinant énergie thermique et photovoltaïque, constituent une autre approche prometteuse. Ces dispositifs récupèrent la chaleur excédentaire générée par les panneaux photovoltaïques pour produire à la fois de l'électricité et de la chaleur, optimisant ainsi leur efficacité énergétique globale. Ce concept vise à améliorer les performances des systèmes solaires en tirant parti de l'ensemble du spectre solaire et en offrant une solution plus complète pour les installations domestiques et industrielles [38, 39].

### **I.3.6.2 Cellules organiques**

Les cellules organiques, basées sur des matériaux tels que les polymères, se distinguent par leur faible coût de fabrication, leur bonne capacité d'absorption et leur flexibilité. Ces avantages les rendent attrayantes pour des applications spécifiques, notamment dans des dispositifs souples ou intégrés. Cependant, elles souffrent d'une durée de vie limitée et de rendements encore modestes, atteignant environ 10 % en laboratoire. Ces limitations représentent des défis majeurs à relever pour leur déploiement à grande échelle [7,39].

## **I.7 Conclusion**

Dans ce chapitre, nous avons abordé les principes fondamentaux des cellules solaires photovoltaïques, en mettant en lumière l'évolution historique et les concepts physiques sous-jacents à cette technologie. L'énergie solaire, source inépuisable et largement disponible, est utilisée pour générer de l'électricité grâce à l'effet photovoltaïque, découvert à la fin du XIXe siècle et approfondi par Albert Einstein en 1923. Le fonctionnement des cellules photovoltaïques repose sur la conversion de la lumière solaire en énergie électrique, un processus complexe en trois étapes : l'absorption des photons, la génération de paires

électron-trou, et la collecte de ces charges photogénérées dans un circuit externe. Nous avons également détaillé les différentes pertes d'énergie associées à ce processus, comme les pertes dues à des photons d'énergie trop faible ou trop élevée par rapport au gap du matériau. Nous avons exploré la structure interne des cellules solaires, comprenant des couches de matériaux semi-conducteurs dopés pour créer une jonction P-N, permettant la séparation des charges et la création d'un courant électrique. Le comportement de la cellule a été décrit à travers des équations caractéristiques, telles que la courbe courant-tension (J-V), et les paramètres associés, comme le rendement quantique externe (EQE) et interne (IQE), qui quantifient l'efficacité de la conversion des photons en porteurs de charge. Enfin, nous avons introduit les différents modèles électriques utilisés pour simuler et optimiser les performances des cellules photovoltaïques, notamment les modèles à une diode et à deux diodes. Ces modèles permettent de mieux comprendre les pertes énergétiques et les effets de la recombinaison des porteurs, tout en offrant une approche simplifiée pour analyser les performances des cellules dans des conditions variées. Ce chapitre fournit une base solide pour comprendre le fonctionnement des cellules solaires, leur optimisation et les défis technologiques qu'elles rencontrent, tout en ouvrant la voie à une exploration plus approfondie des technologies photovoltaïques avancées dans cette étude.

**I.8 Références bibliographiques du Chapitre I**

- [1] C. Alonso, thèse de Doctorat, Université Paul Sabatier – Toulouse III, 2003.
- [2] S. M. Aït-Cheikh, thèse de Doctorat, École nationale polytechnique (ENP) – Alger, 2007.
- [3] C. Cabal, thèse de Doctorat, Université Toulouse III – Paul Sabatier, 2008.
- [4] K. Touafek et al., Revue des énergies renouvelables, centre de développement des énergies renouvelables (CDER), 11 N° 1 (2008) 153–165.
- [5] X. Li, H. Tian, L. Wang, Proceeding, 6<sup>th</sup> International Conference on Materials Science, Machinery and Energy Engineering, 96 (2024) 72–77.
- [6] M. A. Cid-Pastor, thèse de Doctorat, Institut national des sciences appliquées de Toulouse, 2006.
- [7] M. Hadjab, thèse de Doctorat, Université Djallali Liabès de Sidi Bèl Abbès, 2018
- [8] M. Hadjab, mémoire de Magister, Université Djallali Liabès de Sidi Bèl Abbès, Algérie, 2011.
- [9] A. Luque, S. Hegedus, Handbook of Photovoltaic Science and Engineering. Chichester: Wiley, 2003.
- [10] Z. Bendjellouli, mémoire de Magister, Université de Bechar, 2009.
- [11] K. Touafek, mémoire de Magister, Ecole Nationale Polytechnique, Alger, 2005.
- [12] N. Oleksiy, thèse de doctorat, l'institut national des sciences appliquées de Lyon, 2005.
- [13] S. Alem-Boudjemline, thèse de Doctorat, Université d'Angers, 2004.
- [14] S. Berson, thèse de Doctorat, Université Joseph Fourier – Grenoble I, 2007.
- [15] M-T. Dang, thèse de Doctorat, Université Bordeaux 1, 2009.
- [16] M. Urien, Thèse de Doctorat, Université Bordeaux 1, 2008.
- [17] Z. El Jouad, Thèse de Doctorat, Université d'Angers, 2016.
- [18] S. -D Vecchi, thèse de Doctorat, Institut national des sciences appliquées de Lyon–France, 2013.
- [19] B. Thuillier, thèse de Doctorat, l'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2001.
- [20] T. Desrues, thèse de Doctorat, l'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2009.
- [21] E. Leonard, thèse de Doctorat, Institut des Matériaux Jean-Rouxel (IMN) de la faculté des sciences et techniques de Nantes, 2013.
- [22] T. Mambrini, thèse de Doctorat, Université Paris-Sud, 2014.

- [23] G. Poulain, thèse de Doctorat, Institut national des sciences appliquées de Lyon, 2012.
- [24] N. Sahouane, thèse de Doctorat, Université Abou-Bekr Belkaid de Tlemcen, 2016.
- [25] A. Cid-Pastor, thèse de Doctorat, l'institut national des sciences appliquées de Toulouse, 2006.
- [26] S. Berson, thèse de Doctorat, l'Université Joseph Fourier – Grenoble I, 2007.
- [27] N. Kabouch, mémoire de Magister, Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene (USTHB) Alger, 2009.
- [28] S. Petibon, thèse de Doctorat, Université Paul Sabatier – Toulouse III, 2009.
- [29] M. Elbar, thèse de Doctorat, Université Mohamed Khider de Biskra, 2018.
- [30] Y. Pankow, thèse de Doctorat, Centre Nationale de Recherche Technologique de Lille, 2004.
- [31] L. Castaner, S. Silvester, "Modelling Photovoltaic Systems Using PSPICE", Wily, 1<sup>ère</sup> édition, ISBN: 0-470-84528-7, Angleterre, 2002.
- [32] O. Ourahmoun, thèse de Doctorat, Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, 2018.
- [33] T. Desrus, thèse de Doctorat, l'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2009.
- [34] A. Mahfoud, thèse de Doctorat, Université de Sétif 1, 2015.
- [35] W. Bellil, thèse de Doctorat, Université de Blida 1, 2020.
- [36] A. Raddenzati, thèse de Doctorat, Université de Haute Alsace - Mulhouse, 2017.
- [37] <https://energieplus-lesite.be/techniques/photovoltaïque3/types-de-cellules/> (Dernier accès le 10.01.2025).
- [38] <https://www.ef4.be/fr/pv/composants-dun-systeme/cellules-photovoltaïques.html> (Dernier accès le 11.01.2025).
- [39] M. Hadjab, Etat de l'art technologique des cellules solaires photovoltaïques, Editions Universitaires Européennes, ISBN : 978-613-9-50251-6, 2019
- [40] <https://actu.epfl.ch/news/nouveau-record-du-monde-pour-des-cellules-solaires/> (Dernier accès le 12.01.2025).
- [41] <https://www.ise.fraunhofer.de/en.html> (Dernier accès le 13/01/2025).
- [42] E. Saintaimé, Thèse de Doctorat, Université d'Orléans, 2020.

# Chapitre **II**

**Etat de l'art des matériaux CIGS**

## II.1 Introduction

La première génération de cellules solaires repose sur l'utilisation du silicium cristallin (Si) comme matériau absorbant, avec une structure d'homojonction formée de Si (n-Si/p-Si). Ce type de cellule représente actuellement 80 % du marché mondial du photovoltaïque [1]. Toutefois, cette technologie présente certains inconvénients, notamment la nécessité d'utiliser un silicium extrêmement pur et une épaisseur d'environ 200  $\mu\text{m}$ , ce qui entraîne des coûts relativement élevés pour les matières premières et les procédés de fabrication [2]. Pour réduire ces coûts et élargir les applications électroniques et optoélectroniques, une seconde génération de cellules photovoltaïques a émergé, basée sur des matériaux en couches minces. Le principe de cette technologie consiste à créer une couche mince d'un matériau avec une absorption optique élevée, supérieur à celui du silicium cristallin, tout en utilisant un substrat à faible coût [3]. Dans ce cadre, des matériaux à gap direct sont privilégiés, contrairement au silicium qui présente un gap indirect. Parmi les semi-conducteurs fréquemment utilisés comme absorbeurs en couches minces, on retrouve le silicium amorphe (a-Si), le silicium microcristallin ( $\mu\text{c-Si}$ ), le CdTe, le CIGS ( $\text{Cu}(\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x)\text{Se}_2$ ) et le CZTS ( $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S,Se})_4$ ). Récemment, les matériaux chalcopyrites de type CIGS se sont imposés comme des candidats prometteurs pour la fabrication de cellules photovoltaïques à haut rendement, en raison de leurs propriétés électroniques et optiques optimales, ainsi que de leur faible coût de production [4]. Des rendements record de 19.9 % [5] et 20.3 % [6] ont été obtenus respectivement au Laboratoire national des énergies renouvelables (NREL) aux États-Unis [4] et au Centre de recherche sur l'énergie solaire et l'hydrogène (ZSW) en Allemagne [6].

De nombreux laboratoires de recherche étudient actuellement les semi-conducteurs chalcopyrites afin de mieux comprendre leurs propriétés électroniques, structurales, élastiques, mécaniques et optiques. Ces caractéristiques présentent un grand intérêt pour la fabrication de dispositifs optoélectroniques, notamment les cellules solaires et les détecteurs photovoltaïques. Parmi ces matériaux, le CIGS se distingue par ses excellentes propriétés électroniques, électriques et optiques. Il possède une bande interdite directe et un coefficient d'absorption très élevé dans le spectre solaire, faisant de lui un semi-conducteur de premier choix pour les applications photovoltaïques et optoélectroniques. Une cellule solaire à base de CIGS est obtenue par dépôt successif de plusieurs couches minces de matériaux sur un substrat. Son rendement de conversion photovoltaïque dépend fortement des propriétés des

matériaux qui la composent. Ainsi, une compréhension approfondie de ces propriétés est essentielle pour optimiser les performances de cette technologie [7].

Ce chapitre présente une analyse détaillée des propriétés physiques des semi-conducteurs CIGS ( $\text{Cu(In,Ga)Se}_2$ ) et  $\text{Zn(O,S)}$ , utilisés comme matériaux de base dans les cellules solaires à base de CIGS. Il aborde les caractéristiques structurales, électroniques et optiques de ces matériaux, et leur impact sur la performance des cellules solaires. Les cellules solaires CIGS, fabriquées à partir de diséléniure de cuivre, d'indium et de gallium, se distinguent par leur haute efficacité énergétique, leur flexibilité et leur capacité à être intégrées dans des applications variées. La technologie des cellules solaires CIGS repose sur une structure multicouche, incluant une couche de verre, une couche conductrice transparente et une couche absorbante de CIGS, suivie d'une électrode métallique. L'optimisation de cette structure est essentielle pour maximiser l'absorption de lumière et améliorer l'efficacité de conversion. Le diagramme énergétique des bandes de la cellule CIGS montre la relation entre la bande de valence et la bande de conduction, influençant directement la génération et le transport des porteurs de charge sous irradiation solaire. Les propriétés structurales du CIGS, telles que sa structure cristalline en couches, jouent un rôle clé dans la gestion des défauts de réseau et le transport des charges, tandis que ses propriétés optoélectroniques, notamment sa capacité d'absorption dans le spectre visible et infrarouge, sont essentielles pour sa performance en tant que matériau photovoltaïque. Les techniques de dépôt des films CIGS varient entre les méthodes à pression atmosphérique, comme la pulvérisation cathodique et le spray pyrolyse, et les méthodes sous vide, telles que la co-évaporation, permettant de contrôler la qualité de la couche absorbante et d'assurer une haute efficacité des cellules. Chaque méthode présente des avantages et des défis, notamment en termes de coût, de contrôle de l'épaisseur et de la structure cristalline des couches. L'étude approfondie de ces propriétés et techniques est essentielle pour améliorer les performances et la fiabilité des cellules solaires CIGS, en vue de leur industrialisation à grande échelle.

## **II.2 Cellules à base de diséléniure de cuivre, d'indium et de gallium (CIGS)**

### **II.2.1 Technologie des cellules solaires CIGS**

Les cellules solaires à base de diséléniure de cuivre, de gallium et d'indium (CIGS) (Fig. II.1) sont des dispositifs photovoltaïques à couche mince utilisant du séléniure de cuivre, d'indium et de gallium pour convertir la lumière en électricité. Bien qu'encore en phase de commercialisation, leur fabrication présente un potentiel de réduction des coûts, ce qui pourrait favoriser leur adoption à grande échelle. Comparées aux cellules au tellure de

cadmium, elles posent moins de risques environnementaux et sanitaires. Structurées en hétérojonction, les cellules CIGS sont déposées sur un substrat, généralement en verre sodocalcique, métal ou polymère, avec une électrode arrière en molybdène. Un contact frontal transparent, souvent en oxyde conducteur (ITO, ZnO:Al), permet l'absorption de la lumière et la création de paires électron-trou. En laboratoire, des rendements records de 23.2 % ont été atteints, tandis que les modules commerciaux affichent environ 14 % [8].

Les cellules solaires en couches minces (CIGS ou CIS) détiennent un rendement record de 19.9 %, tandis que les modules CIGS affichent des performances comprises entre 11 et 14 %. Elles sont constituées de plusieurs couches superposées : une couche de molybdène (Mo) en contact arrière, une couche absorbante de CIGS d'environ 2 microns obtenue par co-évaporation, une couche tampon de CdS et une couche conductrice transparente de ZnO [9].

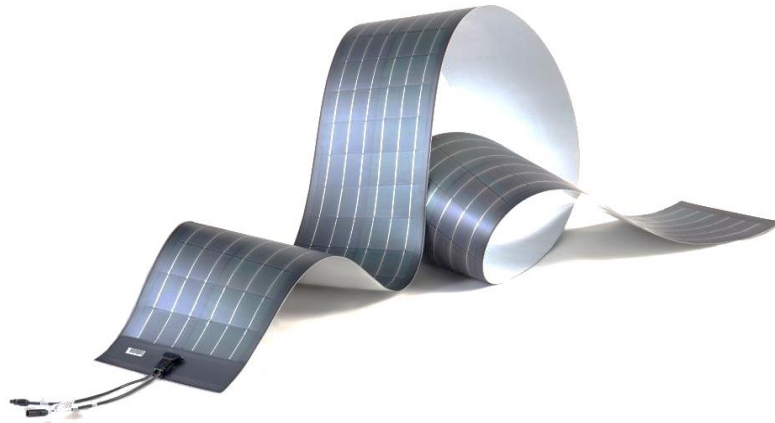


Fig. II.1 Cellules solaire réelle à base de CIGS [8].

Le développement de la filière photovoltaïque CIGS s'inscrit dans un contexte très prometteur, où l'amélioration de la compétitivité repose sur plusieurs facteurs, notamment la réduction de l'épaisseur de la couche CIGS. Cette approche présente un double avantage : elle permet de réduire le coût de production en diminuant le temps de dépôt tout en optimisant l'utilisation de l'indium, un matériau rare et coûteux, sans compromettre la puissance électrique générée. Ce contexte vise à explorer l'amincissement de la couche CIGS à 0.5 micron, puis à 0.1 micron, en s'appuyant sur deux technologies principales : la co-évaporation, qui garantit de hauts rendements mais à des coûts élevés, avec des objectifs de 15 % à 0.5 micron et 10 % à 0.1 micron, et l'électro-dépôt, une alternative plus économique, visant des rendements de 10 % à 0.5 micron et 6 % à 0.1 micron. Les résultats

de cette étude permettront d'anticiper l'évolution de la filière CIGS à moyen terme et de favoriser l'innovation dans le domaine du photovoltaïque [9].

### II.2.2 Structure de la cellule en CIGS

Une cellule CIGS se compose d'un empilement de couches minces déposées successivement sur un substrat, généralement une plaque de verre soda-calcique (Soda-Lime Glass, SLG), comme illustré à la Figure II.2. La première couche appliquée est l'électrode de contact arrière, constituée de molybdène (Mo) avec une épaisseur variant entre 300 nm et 1000 nm. Elle assure la collecte des charges générées dans la cellule et constitue le pôle positif du générateur photovoltaïque. Son dépôt est réalisé principalement par pulvérisation cathodique. Au-dessus de cette couche se trouve l'absorbeur en CIGS, un semi-conducteur de type p qui forme la première partie de l'hétérojonction p-n et où s'effectue l'absorption des photons pour la génération de paires électron-trou. Son épaisseur varie de 1  $\mu\text{m}$  à 2  $\mu\text{m}$ , et il est généralement déposé par co-évaporation ou par recuit de précurseurs métalliques sous atmosphère de sélénium. Pour compléter l'hétérojonction, une couche tampon est intercalée entre le CIGS et les couches supérieures, assurant à la fois une protection physique et une optimisation de la jonction. Actuellement, le sulfure de cadmium (CdS) est le matériau le plus utilisé en raison de ses performances, bien que des alternatives moins toxiques comme  $\text{Zn}(\text{O},\text{S})$ ,  $(\text{Zn},\text{Mg})\text{O}$  ou  $\text{In}_2(\text{S},\text{Se})_3$  soient en cours de développement. Cette couche, d'environ 50 nm d'épaisseur, est généralement déposée par bain chimique (Chemical Bath Deposition, CBD). La couche tampon est surmontée d'une couche fenêtre constituée d'oxyde de zinc (ZnO) et d'un oxyde transparent conducteur (Transparent Conducting Oxide, TCO), tels que  $\text{ZnO}:\text{Al}$  ou l'oxyde d'indium et d'étain (Indium-Tin-Oxide, ITO), déposés par pulvérisation cathodique. Cette couche limite les courts-circuits et assure la transmission du rayonnement solaire vers l'absorbeur CIGS. Son épaisseur se situe entre 300 nm et 500 nm. Enfin, le contact avant est complété par une grille métallique en nickel et aluminium, déposée par évaporation à l'aide d'un masque. Le nickel améliore l'adhérence et protège l'aluminium de l'oxydation due à la présence du TCO sous-jacent [10,11].

#### II.2.2.1 Substrat

Le substrat est la base de la cellule solaire et sert de support mécanique aux différentes couches déposées dessus. Il doit être chimiquement stable et thermiquement résistant aux températures élevées de dépôt des couches. Différents types de substrats sont utilisés [7] :

- **Verre soda-calcique** : Le plus couramment utilisé en raison de sa stabilité thermique et de son faible coût. Il offre une bonne adhésion aux couches et une bonne transmission optique.

- **Acier inoxydable** : Utilisé pour les cellules flexibles. Il est robuste et permet une production en rouleau (roll-to-roll), mais nécessite une barrière de diffusion pour éviter la contamination des couches actives.
- **Polymères** (Kapton, PET) : Très légers et flexibles, mais moins résistants aux hautes températures, limitant certaines méthodes de dépôt.

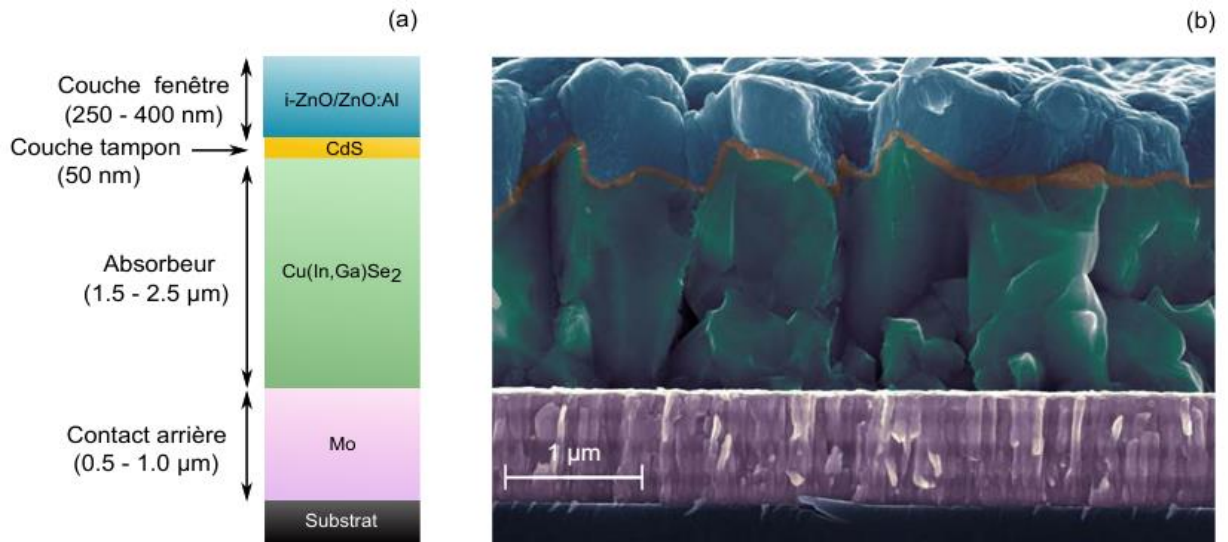


Fig. II.2 Structure d'une cellule CIGS, (a) Schéma du module CIGS en couches minces et (b) Image au microscope électronique à balayage MEB en coupe transversale de la cellule CIGS [12].

Le tableau (II.1) présente les caractéristiques des différents substrats utilisés dans la cellule solaire à base de CIGS. Il met en évidence que le verre soda-calcique est, à ce jour, le substrat offrant les meilleurs rendements en laboratoire [7].

Tableau II.1 Caractéristiques des différents substrats utilisés dans le monde pour le CIGS [7].

	Verre soda-calcique	Polyamide (Polymère)	Acier inoxydable
Température maximale	600°C	500°C	Très haute
Avantages	Apport spontané de sodium	Souple Léger	Souple
Inconvénients	Poids, inhomogénéité du verre	Température de chauffe limitée, cher	Source de diffusion d'impuretés et nécessite d'une barrière isolante
Meilleurs rendements	20.3%	18.7%	17.9%

Le verre soda-calcique est le substrat le plus couramment utilisé en raison de ses propriétés adaptées. Il contient du sodium, qui diffuse vers le CIGS lors du recuit, un phénomène dont l'effet bénéfique sur le fonctionnement de la cellule a été largement démontré par plusieurs études [13, 14].

#### **II.2.2.2. Contact arrière**

Le contact arrière d'une cellule solaire, jouant le rôle d'anode, est constitué d'un métal déposé sur l'arrière de l'absorbeur afin de collecter et transférer les porteurs de charge vers le circuit externe. Il doit répondre à des exigences chimiques, mécaniques et économiques. Différents métaux ont été étudiés à cet effet, notamment le Tungstène, le Molybdène, le Chrome, le Tantale, le Manganèse [15], l'Or, l'Aluminium, l'Argent et le Cuivre. Parmi eux, le Molybdène est le plus couramment utilisé dans les cellules solaires CIGS, aussi bien en recherche qu'en industrie. Il se distingue par sa stabilité à haute température (environ 550 °C lors du procédé de fabrication du CIGS) et par sa faible résistance de contact avec ce matériau. Déposé par pulvérisation cathodique, il présente une épaisseur typique de quelques centaines de nanomètres et une résistivité inférieure à  $5 \times 10^{-5} \mu\Omega \cdot \text{cm}$ . Lors du dépôt du CIGS, le Mo peut réagir avec le Sélénium pour former une fine couche de  $\text{MoSe}_2$ , transformant ainsi la structure en CIGS/ $\text{MoSe}_2$ /Mo. Ce composé, semi-conducteur avec un gap supérieur à celui du CIGS, réduit les recombinaisons à l'interface et confère un comportement ohmique à l'hétérojonction CIGS/Mo [7, 16].

#### **II.2.2.3 La couche absorbante**

L'absorbeur est l'élément clé d'une cellule solaire, où l'absorption des photons entraîne la génération de paires électrons-trous, essentielles à la conversion de l'énergie lumineuse en énergie électrique. Il s'agit ici d'un semi-conducteur de type P appartenant à la famille des chalcogénures I-III-VI<sub>2</sub>, caractérisée par la formule générale :  $(\text{Cu}, \text{Ag})(\text{In}, \text{Ga}, \text{Al})(\text{Se}, \text{S}, \text{Te})_2$ . Les modifications de composition, telles que le remplacement du cuivre par de l'argent, de l'indium par du gallium ou de l'aluminium, et du sélénium par du soufre ou du tellure, influencent significativement les propriétés du matériau, notamment sa largeur de bande interdite (gap), son absorption optique et sa stabilité thermique. Ces ajustements permettent d'optimiser les performances des cellules solaires en fonction des besoins spécifiques en rendement et en stabilité. Parmi ces composés, le cuivre indium gallium sélénium ( $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$  ou CIGS) est le plus étudié et utilisé, tant en recherche qu'en industrie, en raison de son efficacité élevée, de sa flexibilité et de sa compatibilité avec différentes techniques de fabrication, notamment le dépôt en couches minces. Son band gap

ajustable (généralement entre 1.0 et 1.7 eV selon la teneur en gallium) le rend particulièrement adapté aux applications photovoltaïques à haut rendement [7, 17].

#### **II.2.2.4 La couche tampon**

La couche tampon joue un rôle essentiel dans le fonctionnement d'une cellule solaire en assurant à la fois une interface électrique et une protection pour l'absorbeur. Il s'agit d'un semi-conducteur de type n, dont la largeur de bande interdite est supérieure à celle de l'absorbeur. Avec une épaisseur d'environ 50 nm, elle facilite le transport des charges tout en protégeant la surface de l'absorbeur contre les dommages mécaniques et chimiques, notamment lors du dépôt des couches supérieures, comme la fenêtre avant en ZnO. Cette couche joue également un rôle clé dans l'optimisation des performances de la cellule solaire. Elle permet d'adapter la transition énergétique entre l'absorbeur et la fenêtre avant, réduisant ainsi les pertes optiques. De plus, elle contribue à la passivation des défauts de surface de l'absorbeur, limitant les recombinaisons des porteurs de charge et améliorant l'efficacité de conversion. Différents matériaux peuvent être utilisés pour cette couche tampon. Le CdS reste le plus couramment employé, notamment grâce à son efficacité en tant que barrière de transition. Toutefois, son utilisation présente des inconvénients, notamment la toxicité du cadmium et une bande interdite relativement faible (2.4 eV), qui entraîne des pertes optiques dans la région spectrale inférieure à 500 nm. Pour pallier ces limitations, des recherches sont en cours pour le remplacer par des alternatives plus écologiques et performantes, telles que ZnS, Zn(O,OH), In(OH,S) ou In<sub>2</sub>S<sub>3</sub>. Plusieurs techniques sont utilisées pour le dépôt de la couche tampon, parmi lesquelles le bain chimique (CBD), l'électrodépôt, la co-évaporation, la pulvérisation cathodique et la déposition par couches atomiques (ALD). Ces méthodes permettent d'adapter la qualité et la morphologie du dépôt en fonction des besoins spécifiques de la cellule solaire [18].

#### **II.2.2.5 La couche fenêtre avant**

La fenêtre avant d'une cellule solaire est une couche mince composée d'un oxyde métallique transparent et conducteur (TCO), tel que l'oxyde de zinc (ZnO) ou l'oxyde d'indium dopé à l'étain (ITO). Lorsqu'elle est constituée de ZnO, elle se compose généralement de deux sous-couches aux fonctions distinctes. La première couche, en oxyde de zinc intrinsèque (ZnO(i)), d'environ 80 nm d'épaisseur, est hautement résistive afin de limiter les courants de court-circuit entre le contact arrière et la fenêtre avant. La seconde couche, d'environ 400 nm d'épaisseur, est une couche conductrice de ZnO dopée à l'aluminium (ZnO:Al), améliorant ainsi la conductivité tout en maintenant une bonne transparence optique. D'autres éléments tels que le bore, le gallium ou le chlore peuvent

également être utilisés comme dopants pour ajuster les propriétés électriques et optiques du matériau [19-20].

Différentes techniques sont employées pour le dépôt de la fenêtre avant, notamment la pulvérisation cathodique, le bain chimique (CBD), la MOCVD (Metal-Organic Chemical Vapor Deposition) et la déposition par couches atomiques (ALD) [21]. Dans le cadre des travaux réalisés en laboratoire, la fenêtre avant ZnO(i)/ZnO:Al est déposée par pulvérisation cathodique [18].

### II.2.3 Diagramme énergétique des bandes de la cellule à base de CIGS

La figure II.3 illustre le diagramme énergétique des bandes pour une cellule solaire à base de CIGS. La jonction électrique résulte du contact entre le matériau absorbant CIGS de type P et les couches CdS/ZnO de type N. À l'interface CIGS/CdS, les bandes d'énergie présentent une courbure due à la variation du potentiel électrostatique à travers la jonction P-N. Une discontinuité d'énergie positive apparaît au niveau de la bande de conduction du CIGS à l'interface avec la couche tampon. Cette discontinuité doit être optimisée pour garantir de bonnes performances : si elle est trop élevée, elle entrave le passage des électrons photogénérés, réduisant ainsi le photo-courant ; si elle est trop faible, voire négative, elle favorise le courant d'obscurité et les recombinaisons, entraînant une baisse de rendement. Sur le plan électrique, la couche de ZnO intrinsèque complète la fonction de la couche tampon en empêchant le contact direct avec le ZnO:Al, qui est électriquement dégénéré. Grâce à leur large bande interdite, la couche tampon et le ZnO permettent le passage du rayonnement visible, d'où leur appellation de "couches fenêtre". Ce rayonnement est ensuite absorbé par la couche de CIGS, où il est converti en énergie électrique. Les performances globales de la cellule solaire dépendent donc directement des propriétés des couches individuelles et de leurs interfaces. Par exemple, une augmentation de la largeur de bande interdite du CIGS entraîne une élévation de la tension en circuit ouvert, mais au détriment du photo-courant, ce qui peut affecter l'efficacité du dispositif [7, 22]. Contrairement aux cellules en silicium, ce dispositif utilise une hétérojonction. Le photo-courant est généré dans le CIGS, puis traverse les couches de CdS/ZnO, tandis que dans le silicium, la couche N contribue également à la génération du photo-courant. L'hétérojonction présente l'avantage de réduire les pertes optiques dans la zone N par rapport à une homojonction classique.

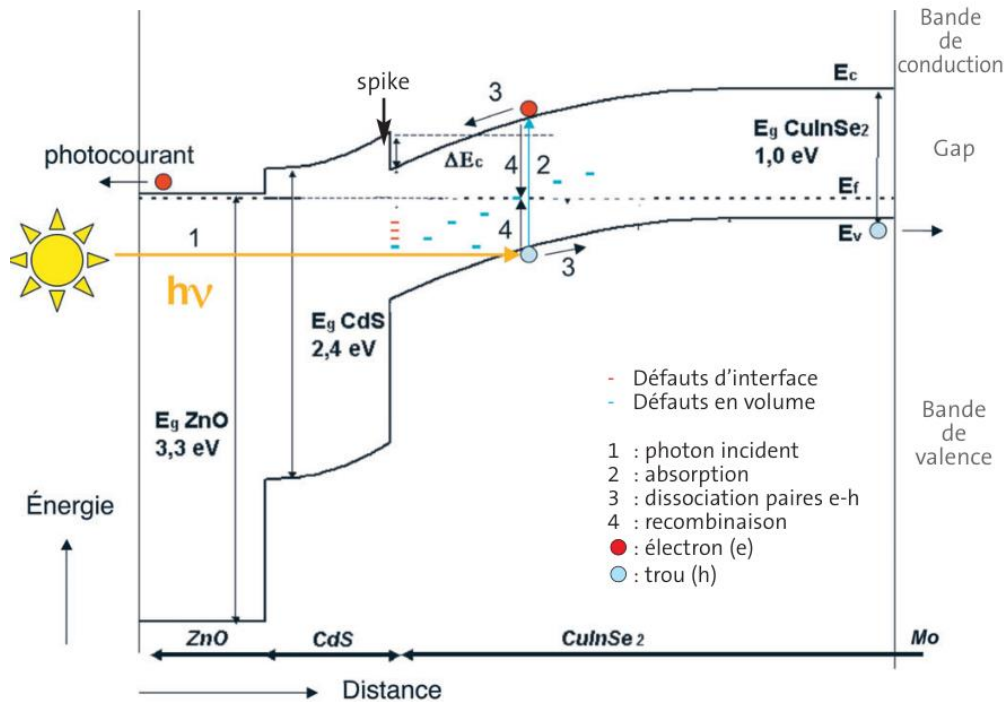


Fig. II.3 Diagramme de bandes de la cellule CIGS/CdS/ZnO (Fonctionnement de l'hétérojonction et génération du photo-courant) [22].

### II.3 Propriétés physiques des matériaux Cu (In, Ga) Se<sub>2</sub>

Les performances optoélectroniques d'une cellule solaire à base de CIGS dépendent étroitement des caractéristiques de son absorbeur, qui joue un rôle clé dans l'absorption et la conversion de l'énergie lumineuse en énergie électrique. En particulier, les propriétés optiques et électroniques du CIGS sont influencées par sa structure cristalline, sa composition chimique et les conditions de dépôt.

Cette section est consacrée à l'analyse des propriétés cristallographiques d'un absorbeur CIGS. Les différentes compositions dérivées, telles que la substitution partielle du cuivre par de l'argent (Ag), de l'indium par du gallium (Ga) ou de l'aluminium (Al), ainsi que du sélénium par du soufre (S) ou du tellure (Te), seront présentées les Figures II.4 et II.5. Ces modifications permettent d'ajuster la largeur de bande interdite du matériau, influençant ainsi les performances globales de la cellule solaire, notamment sa tension en circuit ouvert, son coefficient d'absorption et son rendement de conversion.

#### II.3.1 Propriétés structurales

Les composés CuInSe<sub>2</sub> et CuGaSe<sub>2</sub> et ses alliages sont des semi-conducteurs appartenant à la famille des chalcopyrites. Ces ternaires sont des candidats prometteurs pour la fabrication de cellules solaires à couches minces en raison de leurs propriétés structurales et optiques remarquables. Ces composés possèdent un gap direct, un fort coefficient

d'absorption optique et une grande stabilité thermique face à la photodégradation. Les modules solaires à base de CIGS présentent d'excellentes propriétés optiques, un rendement de conversion élevé, un coût de production réduit et une durabilité à long terme, ce qui les rend compétitifs par rapport à la technologie au silicium actuelle [23].

$\text{CuInSe}_2$  et  $\text{CuGaSe}_2$  se distinguent par la présence de quatre atomes de valence par site atomique. Dans cette structure, le réseau cationique est composé de cations de valence différente, répartis de manière ordonnée. Le  $\text{CuInSe}_2$  peut être considéré comme l'équivalent ternaire de la structure blende de zinc ( $\text{ZnS}$ ) ou sphalérite. Cette dernière, de type diamant, est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées ( $\text{Zn}^{2+}$  et  $\text{S}^{2-}$ ), l'un d'anions et l'autre de cations, qui s'interpénètrent avec un décalage de  $(1/4, 1/4, 1/4)$  (Figure II.4.a) [12, 18].

Dans un composé CIS (famille I-III-VI<sub>2</sub>), les cations  $\text{Cu}^+$  et  $\text{In}^{3+}$  remplacent respectivement les cations  $\text{Zn}^{2+}$ , tandis que le sélénium se substitue au soufre dans la structure blende du  $\text{ZnS}$ . Ce composé peut cristalliser sous différentes structures, illustrées dans la Figure II.4. Lorsque les cations  $\text{Cu}^+$  et  $\text{In}^{3+}$  sont distribués aléatoirement, la structure obtenue est de type sphalérite (Figure II.4.a). En revanche, une répartition ordonnée de ces cations sur les sites cationiques conduit à la formation d'une structure de type chalcopyrite (Figure II.4.b) ou Cu-Au (Figure II.4.c).

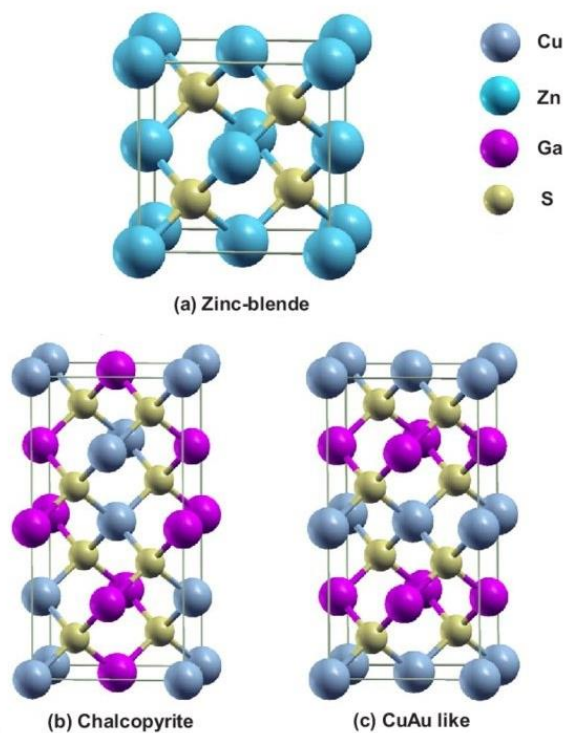


Fig. II.4 Représentation de la structure cristalllographique du  $\text{CuInSe}_2$ . (a) phase zinc-blende (b) Phase chalcopyrite et (c) Phase CuAu [24].

Ce passage d'une structure cubique à une structure quadratique résulte de l'empilement de deux mailles ZnS-blende. Dans la phase Cu-Au, les cations  $\text{Cu}^+$  et  $\text{In}^{3+}$  sont organisés plan par plan, tandis que dans la structure chalcopyrite, ils sont ordonnés au sein de chaque plan. La présence de cations de tailles différentes dans cette dernière entraîne des déformations structurales, modifiant le rapport  $c/a$  des paramètres de maille, qui s'éloigne de la valeur idéale de 2. Dans un composé CIGS, les sites cationiques du groupe III sont partagés entre les atomes d'In et de Ga. Ainsi, le CIGS peut être considéré comme une solution solide entre  $\text{CuInSe}_2$  et  $\text{CuGaSe}_2$  [18].

De plus, dans les composés multinaires de type  $\text{Cu}(\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x)\text{Se}_2$  et  $\text{CuIn}(\text{Se}_{1-y}\text{S}_y)_2$ , les paramètres de maille  $a$  et  $c$  évoluent en fonction des compositions  $x$  et  $y$ , conformément à la loi de Vegard. Ainsi, l'incorporation d'atomes plus petits (Ga à la place de In, S à la place de Se) entraîne une contraction de la maille cristalline, réduisant ainsi le paramètre de maille  $a$ , tandis qu'une substitution par des atomes plus grands provoque son augmentation. De même, la composition influe sur la largeur de la bande interdite, qui varie de 1.0 eV pour  $\text{CuInSe}_2$  à 2.40 eV pour  $\text{CuGaS}_2$ . La Figure II.5 illustre cet effet en montrant l'évolution de la largeur de la bande interdite en fonction du paramètre de maille  $a$  pour différentes composés de type chalcopyrites.

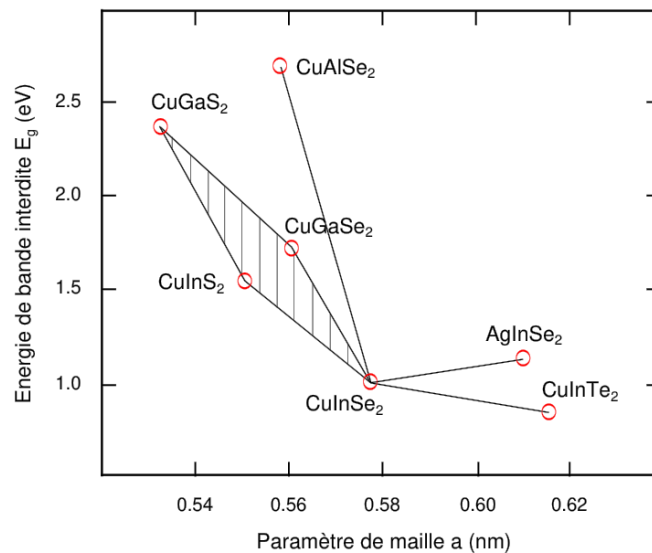


Fig. II.5 Diagramme illustrant l'évolution de la largeur de la bande interdite et du paramètre de maille  $a$  pour certaines chalcopyrites. Le polygone délimite l'ensemble des valeurs de bande interdite pouvant être obtenues par l'alliage quaternaire  $\text{Cu}(\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x)(\text{Se}_{1-y}\text{S}_y)_2$  [12].

La variation de composition, et donc des paramètres de maille, affecte également la largeur de la bande interdite. Comme l'illustre la Figure II.5,  $\text{CuGaS}_2$ , qui possède le plus

petit paramètre de maille parmi les composés ternaires, présente une bande interdite de 2.40 eV, tandis que CuInSe<sub>2</sub>, avec le plus grand paramètre de maille, affiche une bande interdite de 0.98 eV. Ainsi, l'augmentation de la taille des atomes constituant le ternaire entraîne un élargissement des bandes de valence et de conduction, ce qui réduit la largeur de la bande interdite de l'absorbeur.

### II.3.2 Propriétés optoélectroniques

Le contrôle des propriétés électriques des chalcopyrites dépend des défauts intrinsèques du matériau, tels que les anti-sites, les atomes interstitiels et les lacunes atomiques. Dans le CIGS, la lacune de cuivre ( $V_{Cu}$ ) joue un rôle clé en tant qu'accepteur dominant pour les matériaux de type p, tandis que la lacune de sélénium ( $V_{Se}$ ) agit comme le donneur principal pour les matériaux de type n. Grâce à sa tolérance aux écarts de stœchiométrie et à la neutralité électrique de ses défauts, le CIGS est un matériau performant. Lorsque le matériau est fortement déficitaire en cuivre, il forme des complexes de défauts ( $2V_{Cu}^- + In_{Cu}^{++}$ ) à faible énergie de formation, qui n'introduisent pas de niveaux de transition dans la bande interdite. Ce phénomène permet un excès d'indium sans dégrader les performances de la cellule. Un assemblage périodique de ces lacunes de cuivre aboutit à la formation des composés OVC (Ordered Vacancy Compound), de compositions proches de CuIn<sub>3</sub>Se<sub>5</sub> ou CuIn<sub>5</sub>Se<sub>8</sub>. Cependant, certains défauts peuvent être nuisibles. Par exemple, un excès de cuivre entraîne la formation de précipités de Cu<sub>2-x</sub>Se, rendant le matériau polycristallin conducteur et favorisant les court-circuits. De plus, pour maintenir l'électro-neutralité, la présence de défauts accepteurs ( $V_{In}^-, In_{Cu}^{++}$ ) entraîne la formation de défauts donneurs ( $V_{Se}^{++}$ ). Un autre avantage du CIGS est la possibilité d'ajuster son énergie de bande interdite en modulant le taux de gallium. Les meilleurs rendements sont obtenus pour un rapport  $x$  compris entre 0.25 et 0.30, correspondant à une bande interdite de 1.1 à 1.2 eV. L'efficacité des cellules pourrait être liée à la présence d'une couche OVC à l'interface, plus difficile à obtenir dans CuGaSe<sub>2</sub> ou CuInS<sub>2</sub>. Enfin, l'optimisation du rendement des cellules repose sur une distribution contrôlée du gallium dans la couche de CIGS. Une concentration plus élevée en Ga au niveau du contact arrière et de la surface améliore la séparation des porteurs de charge et réduit la recombinaison à l'interface CIGS/Mo. Cela permet d'augmenter la tension de circuit ouvert ( $V_{OC}$ ) grâce à une bande interdite plus large au niveau de la jonction, tout en optimisant le courant de court-circuit ( $J_{CO}$ ) via une meilleure absorption dans l'absorbeur [12].

## II.4 Les techniques de dépôt du CIGS

Il existe plusieurs techniques de synthèse de l'absorbeur CIGS, chacune présentant des avantages et des limitations. Certaines méthodes permettent d'atteindre des rendements de conversion très élevés en laboratoire, mais leur coût de fabrication reste relativement important, limitant ainsi leur application à grande échelle. D'autres procédés, bien que produisant des rendements légèrement inférieurs, offrent un coût de production plus faible, favorisant ainsi leur adoption pour une fabrication industrielle à grande échelle. Il existe plusieurs techniques de dépôt des couches minces de CIGS, qui peuvent être classées en deux grandes catégories :

### II.4.1 Les techniques de dépôt à pression atmosphérique

Les techniques de dépôt hors-vide du CIGS reposent sur un dépôt initial d'un précurseur Cu-In-Ga à pression atmosphérique, suivi d'un recuit sélénisant à haute température (400-600 °C). Elles sont compatibles avec la fabrication en continu (roll-to-roll) et se déclinent en plusieurs catégories.

#### II.4.1.1 Impression

- Impression de CIGS : Synthèse d'une encre de précurseurs Cu, In, Ga, permettant une utilisation optimale des éléments sources et un contrôle précis de la composition et de l'épaisseur.
- Recuit et conversion : Après dépôt, un recuit sous sélénium ou soufre forme le CIGS.
- Nanoparticules Cu-In [25] : Recuit sous  $H_2Se$  → cellules avec un rendement de 10-13 %.
- Nanoparticules d'oxydes [26] : Réduction sous hydrogène + séléniage sous  $H_2Se/N_2$  → rendement de 13.6 % (procédé breveté ISET).
- Procédé Nanosolar : Impression de nanoparticules de 20 nm + recuit rapide (RTP) → rendement certifié de 17.1 % (procédé bas-coût et industrialisable).
- Précurseurs moléculaires [27] : Dépôt de chlorures/nitrates métalliques → recuit sous sélénium → rendement de 6.7 %, mais impuretés de carbone amorphe.
- Méthode à l'hydrazine [28] : Dissolution de chalcogénures métalliques dans l'hydrazine → formation de CIGS pur (15.2 % de rendement), mais problème de sécurité pour l'industrialisation.

### II.4.1.2 Electrodepôt

- Dépôt électrochimique de CIGS : Utilisation de métaux, oxydes ou séléniures via réactions électrochimiques impliquant des chalcogénures métalliques similaires aux dépôts sous vide.
- Electrodepôt des métaux et alliages Cu-In-Ga + recuit rapide (RTP) [29]: Approche industrielle (Solopower → rendement >14 %, Nexcis → rendement 17.3 %).
- Dépôt en une étape d'oxydes Cu-In-Ga (IRDEP) [30] : Rendement de 12.4 %.
- Electrodepôt direct du quaternaire Cu(In, Ga)Se<sub>2</sub> [31]: Peu de rendements publiés (6.9 % seul, 10.9 % avec dépôt Cu + In avant sélénsation).
- Nécessité du recuit : Étape importante pour conférer les propriétés semi-conductrices au matériau, avec un contrôle strict des conditions d'électrodepôt et de recuit.

### II.4.2 Les techniques de dépôt à pression atmosphérique

Les techniques de dépôt sous vide offrent les meilleurs rendements pour les cellules CIGS. Elles se divisent en deux approches principales : la co-évaporation et la pulvérisation cathodique, toutes deux relevant du dépôt physique en phase vapeur (PVD). Ces méthodes varient selon le nombre d'étapes utilisées pour le dépôt du CIGS.

#### II.4.2.1 Sélénsation/sulfuration de précurseurs métalliques

La sélénsation des précurseurs métalliques constitue généralement un procédé en deux étapes, impliquant d'abord le dépôt successif des éléments Cu, In et Ga, suivi d'un traitement thermique en présence de sélénium pour former la couche absorbante CIGS. Les méthodes de dépôt utilisées pour les précurseurs incluent à la fois des techniques sous vide, comme la pulvérisation cathodique — la plus courante — et des techniques à pression atmosphérique. Les couches métalliques sont déposées de manière séquentielle pour assurer une meilleure homogénéité, puis soumises à une sélénsation à des températures supérieures à 400 °C. Toutefois, une diffusion involontaire du gallium vers la face arrière du dispositif peut entraîner la formation d'une structure en double phase CuGaSe<sub>2</sub>/CuInSe<sub>2</sub>, limitant ainsi la tension en circuit ouvert (VOC), contrairement au procédé optimisé dit « three-stage process ». Pour améliorer les performances optoélectroniques, une sulfuration de surface est parfois appliquée, créant un double gradient de bande interdite bénéfique à l'efficacité du dispositif. À ce jour, le meilleur rendement de conversion pour une cellule CIGSSe atteint 20,9 %, obtenu par l'entreprise japonaise Solar Frontier grâce à l'utilisation d'une couche tampon en Zn(O,S) [32].

### II.4.2.2 Co-évaporation

La co-évaporation est la méthode la plus répandue pour le dépôt de couches minces de CIGS. Elle consiste à évaporer simultanément les éléments constitutifs (Cu, In, Ga et Se) sous vide, tout en chauffant le substrat pour contrôler la diffusion des atomes et favoriser une croissance cristalline optimale. Le procédé le plus abouti dans ce domaine est le *three-stage process*, qui permet une maîtrise précise de la composition du CIGS : il débute par la co-évaporation de l'indium, du gallium et du sélénium, suivie de l'introduction du cuivre pour créer un excès, puis d'un réajustement avec In et Ga. Cette approche permet d'obtenir un gradient de gallium dans la couche, ce qui induit un élargissement progressif de la bande interdite et améliore les performances de conversion. Ce procédé a permis d'atteindre des rendements supérieurs à 20 %, avec un record de 21,7 % obtenu par le ZSW (Zentrum für Sonnenenergie- und Wasserstoff-Forschung). Bien que cette technique produise des couches de grande qualité, caractérisées par de larges grains d'environ 2  $\mu\text{m}$  d'épaisseur, le maintien d'une uniformité et d'une stabilité constantes demeure un défi majeur pour sa mise en œuvre à l'échelle industrielle [12].

## II.5 Configuration des cellules solaires multijonctions (CIGS)

Les cellules solaires à multijonctions représentent une voie prometteuse pour améliorer les performances photovoltaïques en exploitant efficacement une plus large gamme du spectre solaire. Cette approche consiste à superposer plusieurs matériaux semi-conducteurs ayant des bandes interdites différentes pour limiter les pertes d'énergie dues à la thermalisation et à la transmission. Quatre principales configurations ont émergé dans ce domaine : les cellules solaires à quatre terminaux, les cellules solaires monolithiques à deux terminaux, les cellules solaires monolithiques à trois terminaux, ainsi que les systèmes utilisant la décomposition spectrale [7, 34, 35].

### II.5.1 Cellule tandem à quatre terminaux (4T)

- **Structure** : Deux sous-cellules fabriquées séparément, puis assemblées.
- **Connexion électrique** : Chaque sous-cellule a ses propres électrodes (contacts indépendants).
- **Avantages** :
  - Pas besoin de courant égal entre les sous-cellules.
  - Chaque cellule peut être optimisée indépendamment (épaisseur, matériaux, etc.).
  - Meilleure tolérance aux défauts d'appariement spectral.

- **Inconvénients :**
  - Système plus complexe au niveau du câblage et de l'intégration.
  - Perte possible de lumière entre les deux cellules si l'optique n'est pas optimisée.

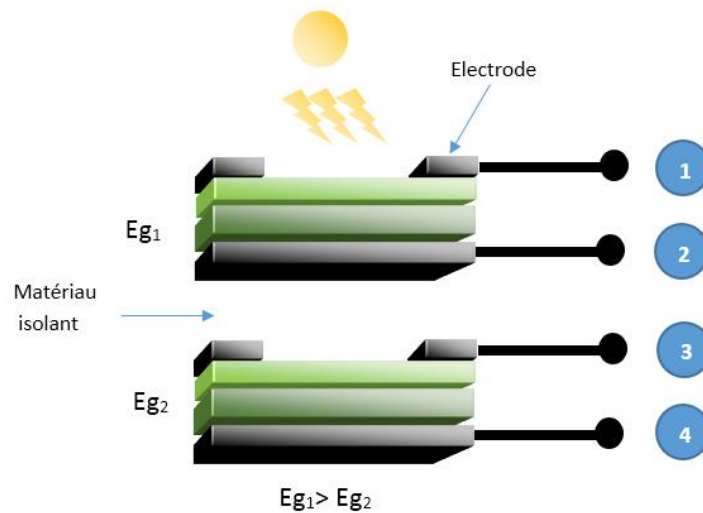


Fig. II.6 Structure des cellules solaires tandem à quatre terminales.

### II.5.2 Cellule monolithique tandem à deux terminaux (2T)

- **Structure :** Sous-cellules empilées dans une seule fabrication (intégration monolithique).
- **Connexion électrique :** Série interne (via une jonction tunnel intermédiaire).
- **Avantages :**
  - Fabrication plus compacte et moins coûteuse.
  - Adaptée pour des modules photovoltaïques standards.
  - Idéal pour des applications industrielles et terrestres.

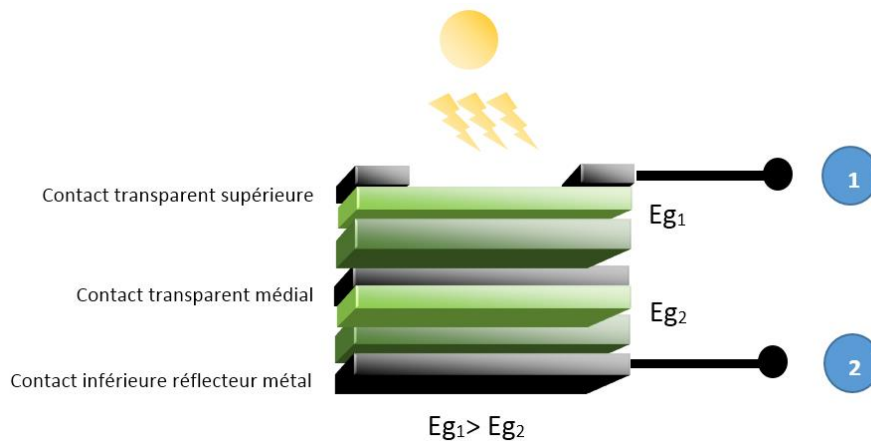


Fig. II.7 Structure d'une cellule solaire monolithique tandem à deux terminales.

### II.5.3 Cellule monolithique tandem à trois terminaux (3T)

- **Structure :** Intégration monolithique avec un terminal partagé entre les deux sous-cellules.
- **Connexion électrique :**
  - Une électrode commune entre les deux jonctions.
  - Deux sorties séparées pour les électrons et les trous.
- **Avantages :**
  - Compromis entre la liberté d'optimisation (comme le 4T) et la simplicité du 2T.
  - Moins de perte par mauvais appariement de courant que dans le 2T.

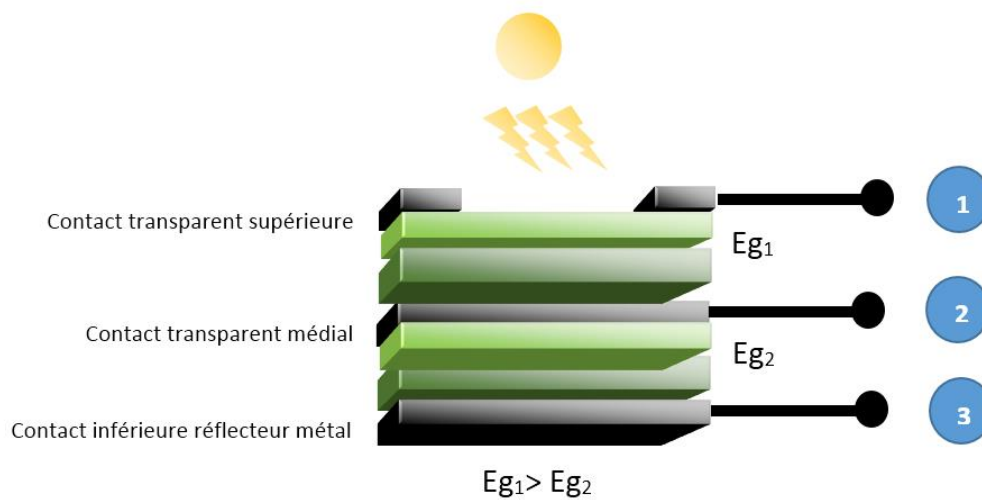


Fig. II.8 Structure d'une cellule solaire monolithique tandem à trois terminaux [7].

### II.5.4 Système à décomposition spectrale (split-spectrum)

- **Structure :**
  - Utilise des prismes, filtres optiques ou réseaux de diffraction pour diviser le spectre solaire.
  - Chaque sous-cellule reçoit une bande spectrale spécifique adaptée à son matériau.
- **Connexion électrique :**
  - Les sous-cellules sont souvent indépendantes électriquement (comme en 4T).
- **Avantages :**
  - Efficacité théorique très élevée.
  - Utilise chaque photon de manière ultra-optimisée.

- **Inconvénients :**

- Systèmes plus complexes et coûteux à mettre en œuvre (surtout en terrestre).

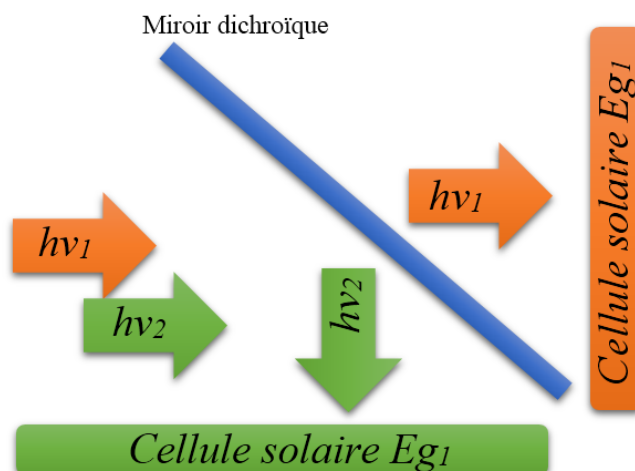


Fig. II.9 Principe de la séparation spectrale à l'aide d'un miroir dichroïque, dirigeant deux portions distinctes du spectre lumineux vers deux cellules solaires.

Tableau II.2 Résumé comparatif des configurations de cellules solaires à jonctions multiples [34].

Configuration	Structure	Avantages	Inconvénients
<b>4 Terminaux (4T)</b>	Deux cellules indépendantes, empilées optiquement, chacune avec des contacts séparés.	Optimisation indépendante de chaque sous-cellule. - Pas de besoin d'appariement de courant. - Choix flexible des matériaux.	- Câblage et intégration complexes. - Pertes optiques potentielles entre les couches.
<b>Monolithique à 2 Terminaux (2T)</b>	Deux cellules empilées et connectées en série via une couche intermédiaire.	- Compact, entièrement intégré. - Compatible avec l'industrie. - Pertes optiques réduites.	- Nécessite un appariement strict du courant. - Combinaisons de matériaux limitées.
<b>Monolithique à 3 Terminaux</b>	Deux cellules empilées avec un troisième contact électrique.	- Meilleure gestion du courant. - Contraintes d'appariement relâchées. - Plus de flexibilité sur les matériaux.	- Fabrication plus complexe. - Connexions électriques spécifiques nécessaires.
<b>Système à séparation spectrale</b>	Un système optique divise le spectre solaire en différentes bandes pour des cellules séparées.	- Utilisation maximale du spectre. - Aucun appariement de courant ou de tension requis.	- Optique coûteuse. - Sensibilité à l'alignement - Difficile à mettre à l'échelle pour de grandes surfaces.

## II.6 Conclusion

Ce chapitre a permis d'examiner en profondeur les principales caractéristiques des cellules solaires à base de CIGS ( $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ ), en mettant l'accent sur les propriétés structurales, optoélectroniques et énergétiques du matériau absorbant. L'analyse des structures cristallines de ces cellules, notamment la phase chalcopyrite, a permis de souligner l'importance d'un contrôle précis des conditions de dépôt pour optimiser l'efficacité photovoltaïque. En particulier, l'ajustement de la composition du matériau absorbant, comme le rapport entre le cuivre, le gallium et le sélénium, s'avère crucial pour améliorer les performances des cellules solaires CIGS. Les différentes techniques de dépôt, telles que le dépôt sous vide et à pression atmosphérique, ont été explorées pour leur capacité à produire des films minces de qualité et homogènes. Parmi ces techniques, les procédés sous vide, tels que la co-évaporation, la pulvérisation cathodique et l'ablation laser, se sont avérés particulièrement efficaces pour obtenir des couches d'absorbants de haute qualité, avec des caractéristiques optimales en termes de cristallinité et de conductivité. Ces procédés permettent également un contrôle plus fin des proportions des éléments dans le matériau, crucial pour atteindre des rendements plus élevés. Cependant, malgré les progrès réalisés dans ces procédés de dépôt, plusieurs défis subsistent pour leur industrialisation à grande échelle. L'un des principaux obstacles réside dans la limitation des taux de dépôt, qui affecte directement le rendement de la production et le coût de fabrication des cellules solaires. En outre, les procédés sous vide, bien que performants, restent coûteux et nécessitent des équipements spécialisés. Ces coûts supplémentaires rendent difficile l'adoption à grande échelle pour des applications commerciales où la réduction des coûts est essentielle pour la compétitivité des cellules CIGS sur le marché. Ainsi, des stratégies d'optimisation des processus de fabrication, ainsi que la recherche de méthodes alternatives à pression atmosphérique, sont nécessaires pour rendre la production des cellules CIGS plus rentable et scalable.

## II.7 Références bibliographiques du Chapitre II

- [1] G. Masson et al., Global Market Outlook for photovoltaics, Rapport technique, EPIA, 2013.
- [2] C. Roger, thèse de Doctorat, université de Grenoble, France, 2013.
- [3] M. Hadjab et al., International Journal of Modeling and Simulation 42(2) (2022) 179–191.
- [4] H. Arbouz et al., International Journal of Hydrogen Energy, 42 (13) (2017) 8827–8832.
- [5] I. Repins et al., 33<sup>rd</sup> IEEE Photovoltaic Specialists Conference, San Diego, California, 1127 (2008) 11–16.
- [6] P. Jackson et al., Progress in Photovoltaics: Research and Applications, 19 (2011) 894–897.
- [7] M. Elbar, thèse de Doctorat, Université Mohamed Khider de Biskra, 2018.
- [8] <https://www.dsnsolar.com/info/cigs-solar-cell-technology-32794779.html> (Dernier accès, le 03.02.2025)
- [9] <https://anr.fr/Projet-ANR-08-HABI-0015> (Dernier accès, le 04.02.2025)
- [10] C. Roger, thèse de Doctorat, Université de Grenoble, 2013.
- [11] M. Hadjab, thèse de Doctorat, Université Djallali Liabès de Sidi Bèl Abbès, 2018.
- [12] J. I. Posada-Parra, thèse de Doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie, 2015.
- [13] F. Kessler et al., Thin Solid Films 481 (2005) 491–498.
- [14] K. Granath et al., Solar Energy Materials and Solar Cells 60 (2000) 279–293.
- [15] K. Orgassa et al., Thin Solid Films 3 (2003) 431–432.
- [16] N. Kohara et al., Solar Energy Materials and Solar Cells 67 (2001) 3–4.
- [17] A. Duchatelet, thèse de Doctorat, Université de Lille 1, 2012.
- [18] T. Sidali, thèse de Doctorat, Université Pierre et Marie Curie, 2015.
- [19] Y. Hagiwara et al., Solar Energy Materials and Solar Cells 67(1) (2001) 267–271.
- [20] B. Sang et al., Solar Energy Materials and Solar Cells 67(1) (2001) 237–245.
- [21] A. Mennad, Revue des Energies Renouvelables, 18, 4 (2015) 713–719
- [22] D. Lincot, J-F. Guillemoles, Institut de Recherche et Développement sur l'Énergie Photovoltaïque (2007) 16–19, Disponible sur le lien :  
<https://www.refletsdelaphysique.fr/articles/refdp/pdf/2007/03/refdp20075p16.pdf>.  
(Dernier accès, le 05.02.2025)
- [23] M. Hadjab et al., Optik - International Journal for Light and Electron Optics 169 (2018) 69–76.

- [24] S. Chen, et al., *Physical Review B* 79 (2009) 165211.
- [25] B. M. Başol, *Thin Solid Films* 361–362 (2000) 514–519.
- [26] V. K. Kapur, et al., *Thin Solid Films* 431–432 (2003) 53–57.
- [27] M. Kaelin, et al., *Thin Solid Films* ( 480–481) (2005) 486–490.
- [28] D. B. Mitzi, et al. *Advanced Materials* 20 (2008) 3657–3662.
- [29] S. Aksu et al., in 37<sup>th</sup> IEEE Photovoltaic Specialists Conference (PVSC) (2011) 310–314.
- [30] A. Duchatelet, thèse de Doctorat, Unité de catalyse et chimie du solide, UCCS, 2012.
- [31] M. E. Calixto, et al., *Journal of the Electrochemical Society* 153 (2006) G521–G528.
- [32] M. A. Green et al., *Progress in Photovoltaics: Research and Applications* 22(7) (2014) 701–710.
- [33] M. A. Green, et al. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 23(1) 2015, 1–9.
- [34] A. Martí et A. Luque, *Next Generation Photovoltaics: High Efficiency through Full Spectrum Utilization*, Institute of Physics Publishing, 2004.
- [35] F. Bouhdjar, Thèse de Doctorat, Université de Biskra, 2016.

# **Chapitre III**

**Cadre théorique de la modélisation et de la  
simulation avec SCAPS-1D**

### III.1 Introduction

La modélisation et la simulation des dispositifs et circuits semi-conducteurs constituent une partie essentielle de la technologie des semi-conducteurs. En effet, il est possible d'évaluer les performances de nouvelles conceptions de dispositifs grâce à la simulation, sans nécessiter de cycles de fabrication coûteux et chronophages. La modélisation des dispositifs semi-conducteurs consiste à représenter le comportement physique d'un dispositif principalement composé de matériaux semi-conducteurs. Ce terme désigne souvent la représentation d'un dispositif sous forme d'un modèle de circuit équivalent, avec des paramètres électriques globalisés, utilisé pour la simulation des circuits intégrés (CI). Cependant, la modélisation des dispositifs englobe à la fois des représentations mathématiques et des simulations physiques. Elle permet de créer des modèles basés sur la physique fondamentale des semi-conducteurs, notamment en tenant compte des profils de dopage des dispositifs. Elle inclut également la conception de modèles compacts de circuits (tels que les modèles de transistors SPICE), qui visent à capturer le comportement électrique des dispositifs sans nécessairement les dériver directement de la physique sous-jacente. Avant l'essor des ordinateurs puissants, la résolution des équations régissant les dispositifs était généralement effectuée analytiquement, en appliquant des approximations drastiques et en se limitant souvent aux dispositifs unidimensionnels. Aujourd'hui, grâce aux avancées en calcul numérique, les modèles de dispositifs complexes sont couramment résolus numériquement en deux et trois dimensions. Par ailleurs, les modèles de circuits sont désormais extraits des sorties des simulateurs de dispositifs [1].

Ce chapitre présente les concepts fondamentaux de la modélisation et de la simulation des dispositifs et circuits semi-conducteurs. À l'issue de ce chapitre, on pourra :

- Comprendre les principes fondamentaux de la modélisation en distinguant les approches analogique et numérique, ainsi que leur rôle dans la représentation des systèmes physiques.
- Identifier les domaines d'application de la modélisation (physique, informatique, biologie, etc.) et saisir son importance dans l'analyse et l'optimisation des phénomènes complexes.
- Différencier les types de simulation informatique, en comprenant les objectifs, les avantages et les limites des simulations statiques, dynamiques, déterministes ou stochastiques.

- Maîtriser les notions de base de la conception des systèmes, notamment les niveaux d'abstraction, la spécification fonctionnelle, la conception hiérarchique et le flot de conception.
- Se familiariser avec l'environnement du logiciel SCAPS-1D, son interface utilisateur, ses fonctionnalités principales et la structure de ses panneaux d'action.
- Définir et configurer correctement un problème de simulation dans SCAPS-1D, en précisant la géométrie, les matériaux, les propriétés physiques, les conditions de fonctionnement et les types de mesures à simuler.
- Lancer une simulation complète et interpréter les résultats obtenus, notamment les courbes J-V, les profils de bandes, les taux de recombinaison, et d'autres paramètres essentiels pour l'analyse de cellules solaires.

### III.2 Qu'est-ce que la modélisation ?

La modélisation est un processus qui consiste à créer une représentation simplifiée et abstraite d'un système, d'un phénomène ou d'une situation réelle. Cette représentation, appelée modèle, peut prendre différentes formes et être élaborée à l'aide de diverses techniques. C'est un outil puissant qui permet de mieux comprendre et prédire le comportement de systèmes complexes dans de nombreux domaines scientifiques et techniques, tels que la physique, la biologie, l'économie, la météorologie, l'ingénierie et l'environnement [2].

De manière générale (Fig. III.1), un modèle est toute représentation utilisée pour représenter un autre élément. Certains modèles sont physiques, comme une maquette, tandis que d'autres sont symboliques (mathématiques) ou purement conceptuels. Un modèle conceptuel peut être dessiné sur papier, décrit en mots ou simplement imaginé. Il sert à nous aider à mieux comprendre et analyser le phénomène qu'il représente. Les modèles conceptuels varient en nature, allant de l'image mentale d'un objet physique familier à l'abstraction des équations mathématiques, qui ne se manifestent pas sous forme d'images perceptibles. Les modèles mathématiques sont généralement décrits par des équations algébriques ou des équations aux dérivées partielles (EDP). La modélisation désigne le processus de création d'un modèle en tant que représentation conceptuelle d'un phénomène donné (par exemple, le transport des porteurs de charge). Un modèle ne représente généralement que certains aspects essentiels du phénomène étudié. Ainsi, deux modèles d'un même phénomène peuvent être différents. Par exemple, le transport des porteurs de charge dans un dispositif semi-conducteur peut être modélisé soit par une approche semi-classique

(comme le modèle de dérive-diffusion, DDM), soit par une approche quantique (comme le modèle hydrodynamique quantique, QHDM) [1, 3].

Un modèle de dispositif (Fig. III.2) est une représentation du comportement physique d'un dispositif à l'aide d'un modèle mathématique abstrait qui l'approxime. Ce modèle peut prendre la forme d'une expression analytique simple (modèle compact) ou d'un système d'équations différentielles résolu numériquement. Le premier type de modèle, plus simple, est généralement utilisé pour la conception de circuits, tandis que le second, plus complexe, est dédié à la conception des dispositifs eux-mêmes. Certains modèles peuvent également combiner ces deux approches [1, 3].

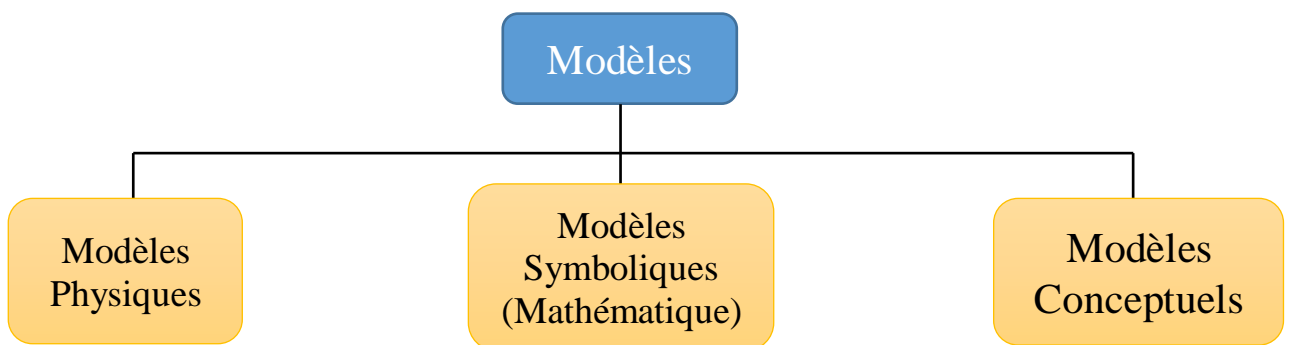


Fig. III.1 Approches de modélisation [1].

La modélisation vise à mieux comprendre, analyser, prédire ou simuler le comportement d'un système ou d'un phénomène réel. Elle permet d'effectuer des expériences, des simulations ou des calculs qui seraient autrement complexes, onéreux ou irréalisables sur le système réel [2]. La modélisation repose sur deux approches distinctes : la modélisation numérique et la modélisation analogique, qui permettent de représenter un système ou un phénomène de manière différente [2] :

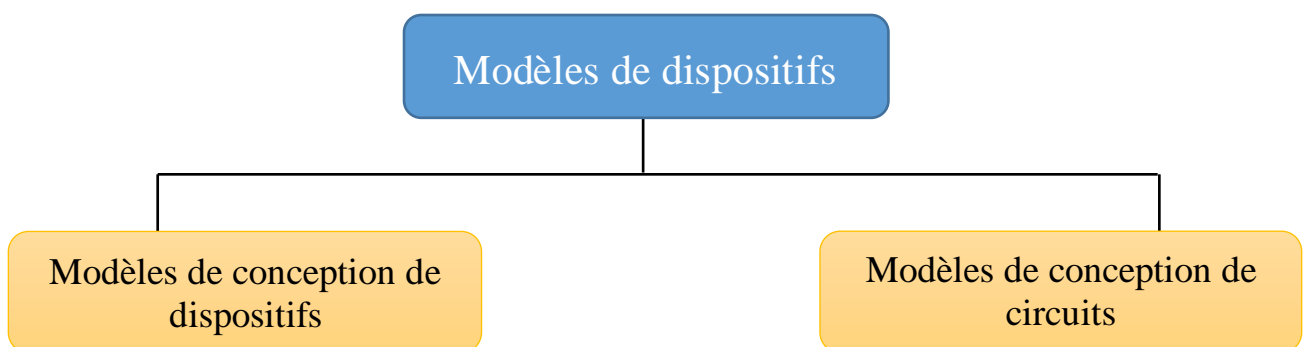


Fig. III.2 Approches de modélisation des dispositifs [1].

### III.2.1 Modélisation numérique

La modélisation numérique repose sur l'utilisation de nombres et d'équations mathématiques pour représenter un système ou un phénomène. Elle est mise en œuvre à l'aide d'ordinateurs et de logiciels spécialisés, qui résolvent ces équations afin de simuler le comportement du système étudié. Cette approche est particulièrement utilisée pour prédire l'évolution de systèmes complexes tels que les phénomènes météorologiques, les modèles économiques ou les processus physiques.

### III.2.2 Modélisation analogique

La modélisation analogique, quant à elle, consiste à utiliser un autre système physique présentant des caractéristiques similaires au phénomène étudié. Elle repose souvent sur des circuits électriques, des structures mécaniques ou des maquettes, permettant ainsi de reproduire le comportement du système en exploitant des grandeurs physiques comme la tension, le courant, la pression ou la force. Cette approche est couramment employée pour l'étude des circuits électroniques, des structures mécaniques et des systèmes hydrauliques.

## III.3 La modélisation dans les domaines scientifiques et techniques

La modélisation est un outil essentiel dans de nombreux domaines scientifiques et techniques, permettant d'analyser, de comprendre et de prédire le comportement de systèmes complexes. Elle repose sur l'élaboration de modèles mathématiques, informatiques ou physiques qui simulent la réalité, facilitant ainsi l'étude de phénomènes difficiles à observer directement. Voici quelques applications majeures de la modélisation dans différentes disciplines [2] :

### III.3.1 Physique

La modélisation joue un rôle fondamental en physique en permettant de décrire les lois naturelles et de prédire le comportement de divers systèmes physiques.

- **Mécanique classique** : les équations de la cinématique permettent de modéliser le mouvement d'un projectile en tenant compte de paramètres comme la vitesse initiale, l'angle de tir et la gravité, facilitant ainsi les calculs de trajectoire.
- **Mécanique quantique** : des modèles comme l'équation de Schrödinger décrivent le comportement des particules subatomiques, expliquant des phénomènes tels que la dualité onde-particule.
- **Relativité générale** : la modélisation des interactions gravitationnelles permet de comprendre la courbure de l'espace-temps et les effets de la gravité sur les corps célestes.

- **Physique des plasmas et astrophysique** : la modélisation des champs magnétiques et des interactions thermonucléaires dans les étoiles permet de prédire l'évolution des étoiles et des galaxies.

### III.3.2 Informatique

La modélisation informatique permet de structurer et d'organiser les données ainsi que de simuler des systèmes complexes pour optimiser leur fonctionnement.

- **Bases de données** : la modélisation des bases de données via des schémas relationnels facilite la gestion et la structuration des informations dans les systèmes informatiques.
- **Intelligence artificielle et apprentissage automatique** : les modèles d'apprentissage supervisé et non supervisé permettent de prédire des comportements à partir de grandes quantités de données.
- **Modélisation des réseaux informatiques** : elle permet de simuler le fonctionnement des infrastructures réseau et d'optimiser les protocoles de communication.

### III.3.3 Biologie et sciences de la vie

La modélisation en biologie aide à comprendre les interactions complexes des systèmes vivants et à prédire leur évolution dans diverses conditions.

- **Biologie moléculaire** : la modélisation des interactions entre protéines et acides nucléiques permet d'étudier la régulation génétique et le fonctionnement des cellules.
- **Cinétique enzymatique** : des modèles comme l'équation de Michaelis-Menten aident à comprendre et prédire la vitesse des réactions enzymatiques dans les cellules.
- **Écologie et dynamique des populations** : les modèles de croissance des populations, tels que les modèles logistiques et de Lotka-Volterra, permettent d'anticiper l'évolution des espèces et les interactions proie-prédateur dans un écosystème.
- **Biologie des systèmes** : la modélisation des réseaux métaboliques aide à comprendre les interactions entre les différentes voies métaboliques d'une cellule et à prédire le comportement global du système.

Grâce à la modélisation, les scientifiques et ingénieurs peuvent mieux appréhender des systèmes complexes, développer de nouvelles technologies et améliorer les processus existants dans de nombreux domaines.

### III. 4 Qu'est-ce que la simulation ?

En langage courant, la simulation désigne l'imitation d'un phénomène réel. Plus précisément, la simulation correspond à la mise en œuvre d'un modèle permettant de représenter et d'analyser le comportement d'un système dans des conditions spécifiques. Ce processus donne vie au modèle et permet d'observer comment un phénomène évolue en fonction de divers paramètres. La simulation est largement utilisée dans de nombreux domaines scientifiques et technologiques pour explorer, tester et valider des concepts avant leur application dans le monde réel. Elle permet d'éviter des coûts élevés, des risques ou des contraintes expérimentales. Par exemple, en aéronautique, les simulateurs de vol permettent aux pilotes de s'entraîner dans des conditions proches de la réalité sans danger. En médecine, la simulation permet de modéliser la propagation d'épidémies ou d'entraîner les chirurgiens sur des modèles virtuels avant d'intervenir sur des patients [4, 5].

#### III.4.1 Simulation informatique et types de simulation

La simulation informatique est devenue un outil essentiel pour l'étude et l'optimisation des systèmes complexes en physique, chimie, biologie, ingénierie et économie. Elle repose sur des algorithmes et des logiciels capables d'exécuter des modèles mathématiques décrivant le comportement d'un système en fonction du temps et des conditions initiales.

On distingue plusieurs types de simulations, notamment [6, 7] :

- **Simulation dynamique** : Elle permet d'observer l'évolution d'un système en fonction du temps. Par exemple, en physique, la simulation de la propagation d'une onde électromagnétique dans un matériau permet d'analyser son interaction avec ce dernier.
- **Simulation en régime permanent (steady-state)** : Ce type de simulation étudie le comportement d'un système après que les conditions transitoires initiales se sont stabilisées. Il est particulièrement utilisé en électronique et en thermodynamique pour analyser le fonctionnement des circuits électriques ou des systèmes énergétiques à l'équilibre.
- **Simulation en temps réel** : Elle reproduit un phénomène à la même vitesse que dans la réalité. Par exemple, les simulateurs de conduite automobile fonctionnent en temps réel pour offrir une expérience immersive et réaliste aux utilisateurs.
- **Simulation discrète et continue** : Une simulation discrète représente un système dont l'état évolue par étapes successives (exemple : modélisation des files d'attente dans un supermarché), tandis qu'une simulation continue suit

l'évolution d'un système sans interruption, comme les équations décrivant le mouvement des fluides en mécanique des fluides.

### III.4.2 Applications et avantages de la simulation

Grâce aux progrès des ordinateurs et des algorithmes, la simulation est aujourd'hui un outil incontournable dans la recherche et l'industrie. Ses principaux avantages sont [1, 4-7] :

- **Réduction des coûts** : Permet d'éviter des essais physiques coûteux et de limiter l'utilisation de matériaux onéreux.
- **Sécurité** : Évite les risques associés aux tests en conditions réelles (par exemple, simulation de catastrophes naturelles pour élaborer des plans de prévention).
- **Optimisation** : Aide à améliorer les performances et à optimiser les processus industriels avant leur mise en production.
- **Formation et pédagogie** : Permet d'entraîner des professionnels et d'enseigner des concepts complexes de manière interactive et immersive.

Ainsi, la simulation est un outil puissant qui, couplé à la modélisation, joue un rôle fondamental dans l'innovation et le développement technologique.

### III.5 Notions fondamentales sur la conception des systèmes

En raison de la complexité croissante et de l'hétérogénéité des systèmes électroniques modernes, les concepteurs sont aujourd'hui confrontés à des défis multidimensionnels impliquant l'intégration de multiples disciplines (électronique, informatique, télécommunication, etc.) et de technologies variées (CMOS, MEMS, RF, optoélectronique, etc.). La nature pluridisciplinaire de ces projets, combinée à la pression croissante pour réduire les délais de mise sur le marché, impose la mise en œuvre de méthodes rigoureuses et d'outils performants permettant d'accélérer et de fiabiliser le processus de conception. Il devient ainsi indispensable de recourir à des plateformes de co-conception facilitant la modélisation, la simulation, la vérification, ainsi que l'implémentation de circuits analogiques, numériques et mixtes. Par ailleurs, les concepteurs doivent assurer la coordination et la gestion cohérente de tous les aspects impliqués dans un cycle de conception complet. Cela inclut notamment la définition des spécifications fonctionnelles et des performances attendues, le choix et la validation des modèles comportementaux et physiques, l'application rigoureuse des règles de conception propres à chaque technologie, ainsi que la prise en compte des objectifs de coût, de consommation énergétique, de fiabilité, et de contraintes temporelles. S'y ajoutent également les choix méthodologiques (top-down, bottom-up, approche hiérarchique), les langages de description de matériel (comme VHDL,

Verilog, SystemC), l'intégration d'outils d'automatisation de la conception (EDA), et enfin, les étapes de prototypage, de test et de fabrication. La maîtrise de l'ensemble de ces éléments est cruciale pour garantir le succès d'un projet électronique dans un contexte industriel hautement compétitif [8].

### III.5.1 Description de la conception hiérarchique

Avec l'augmentation continue de la complexité et de l'hétérogénéité des systèmes intégrés sur une seule puce (SoC - System on Chip), une approche hiérarchique de la conception s'impose aujourd'hui comme une nécessité incontournable. Cette hiérarchisation permet de structurer le processus de conception en plusieurs niveaux d'abstraction, facilitant ainsi la gestion de la complexité globale du système. Concrètement, le concepteur débute par la définition et la validation fonctionnelle du système au moyen de blocs fonctionnels ou de modules abstraits (niveau système ou comportemental). Il affine ensuite progressivement chaque bloc en descendant les niveaux de description jusqu'à atteindre les détails physiques, comme la conception de circuits élémentaires au niveau des transistors ou des portes logiques. Cette démarche repose sur le principe de la décomposition du cahier des charges initiales en sous-ensembles plus simples à traiter, chacun correspondant à un niveau hiérarchique donné [9].

Deux stratégies principales structurent cette hiérarchie : la conception descendante (*Top-Down*), où l'on part des spécifications globales pour aller vers les détails de mise en œuvre, et la conception ascendante (*Bottom-Up*), qui consiste à construire des modules de base pour ensuite les assembler en systèmes plus complexes. À chaque niveau, des entités spécifiques (composants, modules, interfaces, etc.) sont utilisées pour décrire la topologie fonctionnelle et structurelle du système. Cette approche facilite non seulement la réutilisation de blocs existants (IP blocks), mais aussi la vérification et la validation à différents stades du processus, tout en réduisant les risques d'erreurs et en améliorant la productivité du cycle de développement des circuits intégrés [10].

La fig. III.3 illustre une vue d'ensemble de la conception hiérarchique selon une approche descendante (top-down). Dans ce schéma, le système est structuré en trois niveaux hiérarchiques successifs [8] :

- Au **niveau système**, la structure globale est représentée à l'aide de blocs fonctionnels, chacun remplissant un rôle spécifique dans le fonctionnement général.
- Au **niveau bloc**, chaque bloc fonctionnel est décrit en termes de circuits électroniques assurant la réalisation de la fonction souhaitée.

- Au **niveau circuit**, les éléments de base sont des composants électroniques fondamentaux tels que les transistors, diodes, résistances, etc.

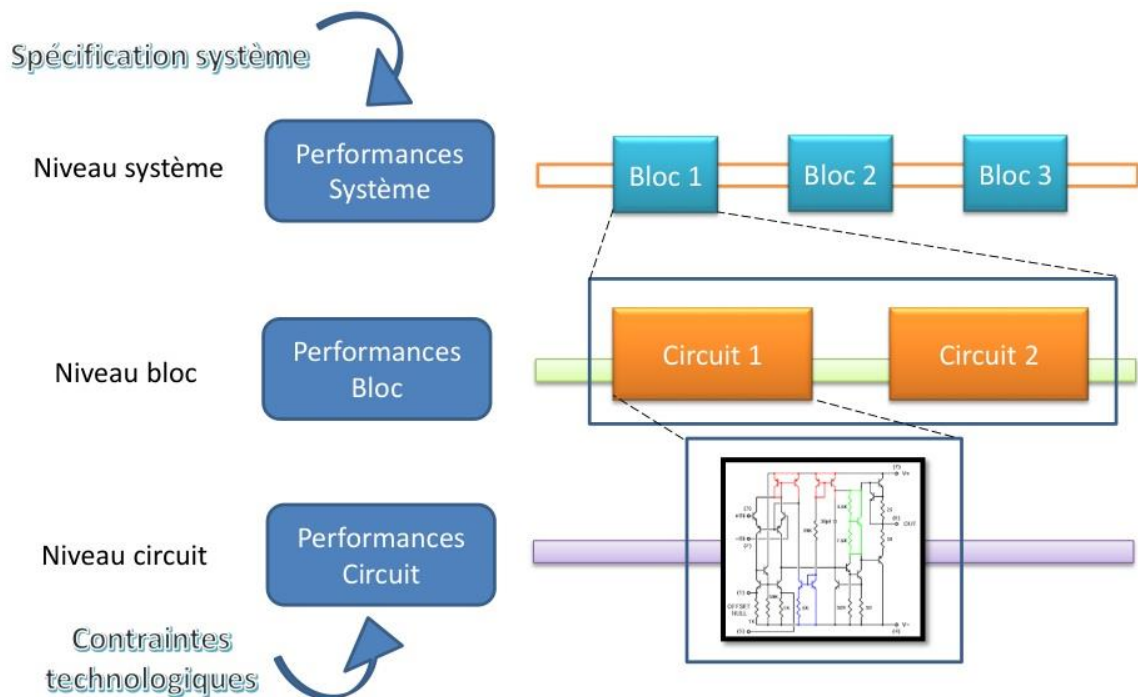


Fig. III.3 Description de la conception hiérarchique [10].

La conception hiérarchique repose sur une double contrainte : d'une part, les spécifications système dictées par le client, qui définissent les performances attendues ; d'autre part, les contraintes technologiques, qui imposent des limites à respecter lors de la conception au niveau physique.

### III.5.2 La spécification

La spécification constitue la première étape du processus de développement d'un système, matérialisée sous la forme d'un cahier des charges. Elle consiste à identifier précisément les exigences fonctionnelles du système ainsi que les contraintes techniques ou économiques liées à sa réalisation. Elle permet également de définir une architecture directrice (ou schéma directeur) qui guidera la conception. En somme, spécifier un système, c'est répondre à la question essentielle : « Que doit faire ce système ? » [10].

### III.5.3 Flot de conception

Le flot de conception désigne l'ensemble des décisions et des étapes permettant de passer d'un niveau d'abstraction à un autre dans la hiérarchie de conception.

Le parcours descendant (*Top-Down*) vise à propager les spécifications du niveau système vers les niveaux inférieurs, jusqu'à atteindre une description détaillée sous forme

de schémas transistoriels. À l'inverse, le parcours ascendant (*Bottom-Up*) consiste à valider, étape par étape, que l'implémentation réalisée à bas niveau respecte les exigences initiales définies au plus haut niveau [8, 10].

#### III.5.4 Niveaux d'abstraction

Dans la conception des systèmes analogiques, les circuits peuvent être modélisés à différents niveaux d'abstraction. Ces niveaux permettent de représenter un circuit de manière plus ou moins détaillée, selon les besoins [8, 10] :

- Le niveau fonctionnel définit les relations entrée/sortie de manière idéale, sans prendre en compte les limitations physiques.
- Le niveau comportemental décrit les caractéristiques électriques du circuit en intégrant les non-idéalités liées à sa réalisation pratique.
- Le niveau circuit, quant à lui, donne une description fine en termes de composants élémentaires (transistors, etc.).

L'utilisation de ces différents niveaux d'abstraction permet d'adapter les outils de conception à chaque phase du projet, en équilibrant au mieux la rapidité de développement et la précision des résultats obtenus.

### III.6 Logiciel de simulation numérique SCAPS-1D

#### III.6.1 Préface

Quelle que soit la structure adoptée pour une cellule solaire, l'optimisation de ses paramètres reste une étape cruciale. En général, les éléments à ajuster concernent principalement les épaisseurs et les niveaux de dopage des différentes couches constituant la cellule. Cette optimisation vise à analyser l'effet de ces paramètres sur le rendement, dans le but de concevoir une architecture offrant une efficacité maximale. Elle peut être réalisée soit par voie expérimentale, soit à l'aide de la simulation numérique. L'optimisation expérimentale, bien que reflétant fidèlement la réalité, demeure fastidieuse, chronophage et coûteuse. De plus, elle ne permet pas toujours d'accéder à certains paramètres internes de la cellule. À l'inverse, l'optimisation par simulation, fondée sur un modèle mathématique du système réel, présente plusieurs avantages significatifs :

- Elle évite la fabrication répétée de prototypes avec des configurations différentes.
- Elle est indépendante de la technologie utilisée, ce qui permet de faire varier les paramètres dans un large éventail.

- Elle offre la possibilité d'isoler l'impact de chaque zone de la cellule, même lorsque certains paramètres sont interdépendants (comme la mobilité, la longueur de diffusion ou la durée de vie des porteurs).

Après avoir introduit les concepts fondamentaux des cellules photovoltaïques en couches minces, nous allons analyser leurs caractéristiques en utilisant un outil de simulation adapté. Ces dernières années, la simulation des cellules minces s'est largement développée grâce à divers logiciels permettant de comprendre, prédire et optimiser leurs performances. Ces outils reposent sur la résolution numérique d'équations bien connues en physique des semi-conducteurs : l'équation de Poisson et les équations de continuité des électrons et des trous, qui décrivent les phénomènes de conduction et les régions de charge d'espace. En raison de leur nature non linéaire, ces équations ne peuvent être résolues analytiquement, nécessitant ainsi des méthodes numériques. Parmi les logiciels les plus utilisés figurent AMPS-1D, PC-1D, SCAPS-1D et SILVACO-Atlas.

### III.6.2 Présentation du SCAPS-1D

SCAPS-1D (Solar Cell Capacitance Simulator, 1 Dimension) est un programme de simulation, développé par le département des systèmes électroniques et informatiques (ELIS) de l'université de Gent en Belgique, est un outil numérique spécifique aux cellules solaires unidimensionnelles. Son développement a été assuré par plusieurs chercheurs, dont *A. Niemegeers, M. Burgelman, K. Decock, J. Verschraegen* et *S. Degrave* [11].

Le logiciel SCAPS-1D offre plusieurs avantages notables [12] :

- Il permet un accès direct et modifiable aux fichiers d'entrée, lesquels sont disponibles sous format texte. Cela inclut les données spectrales ainsi que les paramètres physiques et électroniques du dispositif.
- Il offre la possibilité de modéliser les interfaces entre les différentes couches, tout en tenant compte des phénomènes de recombinaison qui peuvent s'y produire.
- Il autorise l'intégration de résistances série et permet la simulation des caractéristiques capacité-tension (C-V) ainsi que capacité-fréquence (C-f).
- Enfin, SCAPS se distingue par sa rapidité d'exécution, ce qui le rend particulièrement adapté aux études paramétriques et aux analyses d'optimisation.

### III.6.3 Modèle physique

La simulation unidimensionnelle réalisée avec le logiciel SCAPS-1D repose sur la résolution numérique d'un système d'équations comprenant l'équation de Poisson ainsi que les équations de continuité. Ces équations sont résolues en chaque point du maillage du

dispositif étudié en appliquant la méthode des différences finies, tout en respectant les conditions aux limites appropriées. La résolution numérique du système discrétisé et normalisé est assurée par l'algorithme de Newton-Raphson. Par ailleurs, un modèle de la densité d'états (DOS) est nécessaire pour la simulation numérique.

### III.6.3.1 Equation de Poisson [13, 14]

La présence de charges libres et liées dans les matériaux semi-conducteurs constituant la cellule solaire induit une distribution de charge dans son environnement, caractérisée par une densité  $\rho(x)$ . Cette distribution génère un champ électrique résultant d'un potentiel électrostatique  $\psi(x)$ . La densité de charge, est la somme des densités de trous et d'électrons libres, de concentrations respectives  $p(x)$  et  $n(x)$  des densités des donneurs et des accepteurs ionisés, de concentrations respectives  $N_D^+(x)$  et  $N_D^-(x)$  et la densité  $\rho_{def}$  des porteurs piégés par des centres de défauts actifs. Ainsi, la densité de charge au sein de la cellule s'écrit :

$$\rho(x) = q \left[ p(x) - n(x) + N_D^+(x) - N_D^-(x) + \frac{\rho_{def}}{q} \right] \quad (\text{III. 1})$$

Où :  $q$  est la charge élémentaire.

Il s'ensuit que l'équation de Poisson s'écrit sous la forme :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ -\varepsilon(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right] = q \left[ p(x) - n(x) + N_D^+(x) - N_D^-(x) + \frac{\rho_{def}}{q} \right] \quad (\text{III. 2})$$

À l'équilibre thermodynamique, les concentrations des porteurs libres, à savoir les électrons et les trous, sont déterminées en fonction du niveau de Fermi, conformément aux équations III.3 et III.4 :

$$n = N_C e^{\frac{E_F - E_C}{kT}} \quad (\text{III. 3})$$

$$p = N_V e^{\frac{E_V - E_F}{kT}} \quad (\text{III. 4})$$

Toutefois, en présence d'une tension de polarisation appliquée et/ou d'une excitation lumineuse, le système se trouve en situation hors équilibre, et ces concentrations doivent alors être exprimées à partir des quasi-niveaux de Fermi, comme indiqué dans les équations III.5 et III.6 :

$$n = N_C e^{\frac{E_{Fn} - E_C}{kT}} \quad (\text{III. 5})$$

$$p = N_V e^{\frac{E_V - E_{Fp}}{kT}} \quad (\text{III. 6})$$

Où :

$N_C$  et  $N_V$  sont les densités d'états effectifs dans la bande de conduction et la bande de valence respectivement.

$E_{Fn}$  et  $E_{Fp}$  sont les quasi-niveaux de Fermi pour les électrons et les trous respectivement.

Les concentrations des donneurs et des accepteurs ionisés dépendent des niveaux d'énergie introduits par le dopage, situés à proximité des bandes de conduction et de valence. Si  $E_D$  et  $E_A$  désignent respectivement les énergies des niveaux donneurs et accepteurs, alors, à l'équilibre thermodynamique, leurs concentrations ionisées s'expriment selon les relations III.7 et III.8 :

$$N_D^+(x) = \frac{N_D}{1+2e^{\left(\frac{E_F - E_D}{kT}\right)}} \quad (\text{III. 7})$$

$$N_A^-(x) = \frac{N_A}{1+4e^{\left(\frac{E_A - E_F}{kT}\right)}} \quad (\text{III. 8})$$

Le facteur pré-exponentiel 2 dans l'équation (III.7) traduit la dégénérescence liée aux deux orientations possibles de spin lors de l'échange d'énergie entre des donneurs monovalents et la bande de conduction. De même, le facteur 4 présents dans l'équation (III.8) reflète la dégénérescence résultant des deux états de spin pour les accepteurs monovalents, en interaction avec la bande de valence, laquelle est formée des sous-bandes des trous lourds et des trous légers.

En régime hors équilibre, les concentrations se définissent à partir des quasi-niveaux de Fermi et peuvent être exprimées selon les relations suivantes :

$$N_D^+(x) = \frac{N_D}{1+2e^{\left(\frac{E_{Fn} - E_D}{kT}\right)}} \quad (\text{III. 9})$$

$$N_A^-(x) = \frac{N_A}{1+4e^{\left(\frac{E_A - E_{Fp}}{kT}\right)}} \quad (\text{III. 10})$$

Il est à noter que lorsque les états pièges d'électrons et/ou de trous agissent comme des centres de défauts actifs, ils se chargent respectivement de manière négative (en cas de

capture d'un électron) ou positive (en cas de capture d'un trou). En conséquence, la densité des centres de défauts actifs est proportionnelle à la somme des concentrations des porteurs piégés, électrons et trous. Ces concentrations peuvent également être exprimées, selon que le système est à l'équilibre thermodynamique ou en dehors de cet équilibre, en fonction du niveau de Fermi ou des quasi-niveaux de Fermi.

### III.6.3.2 Equation de continuité

Prenons, à titre d'exemple, un élément de volume d'une cellule solaire, d'épaisseur  $dx$ , dans lequel se produisent simultanément les phénomènes de diffusion, de dérive, de génération et de recombinaison des porteurs de charge, comme illustré dans la figure III.4 [14, 15].

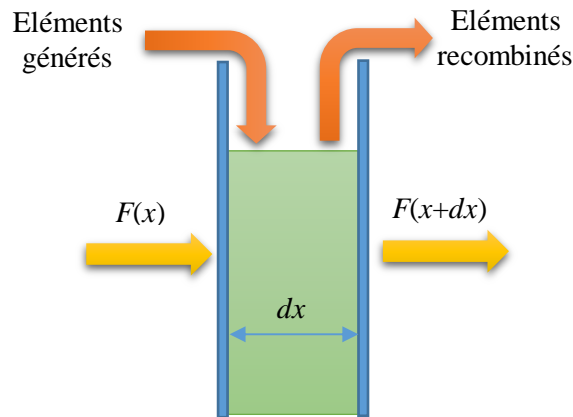


Fig. III.4 Principe de l'équation de continuité.

Lorsque le flux de porteurs entrants  $F(x)$  est supérieur à celui des porteurs sortants  $F(x+dx)$ , il en résulte une augmentation de la concentration en porteurs. Par ailleurs, l'absorption des photons dans le matériau entraîne la génération de paires électron-trou à un taux  $G_L$ , tandis que ces porteurs peuvent se recombiner à un taux  $R_i$ , qui dépend de la nature des porteurs impliqués. Par conséquent, la variation de la concentration  $C$  des porteurs est décrite par l'équation de continuité suivante :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = - \left( \frac{\partial F}{\partial x} \right) + G_L - R_i \quad (\text{III. 11})$$

Étant donné que les densités des électrons et des trous sont respectivement reliées à leurs flux correspondants par les relations suivantes :

$$J_n = -eF_n \quad (\text{III. 12})$$

Et :

$$J_p = -eF_p \quad (\text{III. 13})$$

Ainsi, les équations de continuité associées aux électrons et aux trous peuvent être exprimées sous les formes suivantes :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \left( \frac{dJ_n}{dx} \right) + G_L - R_n \quad (\text{III. 14})$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \left( \frac{dJ_p}{dx} \right) + G_L - R_p \quad (\text{III. 15})$$

La variation des quantités  $E_C$  et  $E_V$  étant directement reliée à la variation du potentiel électrostatique, on montre que :

$$J_n = \mu_n n \frac{\partial E_{Fn}}{\partial x} \quad (\text{III. 16})$$

Et :

$$J_p = \mu_p p \frac{\partial E_{Fp}}{\partial x} \quad (\text{III. 17})$$

Par ailleurs, à l'équilibre thermodynamique, les densités de courant des électrons et des trous, données respectivement par les équations (III.16) et (III.17), sont exprimées en fonction du *niveau de Fermi*.

En résumé, les principales équations utilisées par SCAPS-1D pour décrire le comportement du dispositif à l'état solide sont les suivantes :

$$\frac{d}{dx} \left( -\varepsilon(x) \frac{d(\varphi)}{dx} \right) = q\rho \quad (\text{III. 18})$$

$$\frac{1}{q} \frac{dJ_n}{dx} = R_n(x) - G(x) \quad (\text{III. 19})$$

$$\frac{1}{q} \frac{dJ_p}{dx} = G(x) - R_p(x) \quad (\text{III. 20})$$

$$J_n = \mu_n n \frac{\partial E_{Fn}}{\partial x} \quad (\text{III. 21})$$

$$J_p = \mu_p p \frac{\partial E_{Fp}}{\partial x} \quad (\text{III. 22})$$

L'expression (III.18) correspond à l'équation de Poisson, où  $x$  représente la position (longueur du dispositif),  $\epsilon$  est la constante diélectrique,  $\phi$  désigne le potentiel électrostatique local, tandis que  $q$  est la charge élémentaire et  $\rho$  la densité de charge totale. Les équations (III.19) et (III.20) sont les équations de continuité des électrons et des trous libres, respectivement. Les termes  $J_n$  et  $J_p$  correspondent aux densités de courant des électrons et des trous, tandis que  $R_n(x)$  et  $R_p(x)$  désignent les vitesses de recombinaison des porteurs. Le terme  $G(x)$  représente le taux de génération optique des porteurs en fonction de  $x$ , résultant de l'illumination appliquée au dispositif.

Il convient de souligner que les équations (III.21) et (III.22) sont des expressions générales englobant les phénomènes de diffusion, de dérive et de transport induits par les champs effectifs résultant des variations de bandes d'énergie, de l'affinité électronique et des gradients de densité d'états. Dans ces équations,  $\mu_n$  et  $\mu_p$  désignent respectivement la mobilité des électrons et des trous [16].

Les premiers tests de simulation, réalisés par Marc Burgelman et al. [11, 12], ont porté sur des cellules solaires à base de CdTe et de Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub>, montrant une excellente concordance entre les résultats numériques et expérimentaux. L'un des atouts majeurs de ce logiciel est sa capacité à simuler des structures comprenant jusqu'à sept couches, en plus des contacts avant et arrière. Il permet d'intégrer divers profils de dopage, ainsi que des distributions énergétiques personnalisées des niveaux donneurs et accepteurs, tant en volume qu'aux interfaces, sous un éclairage avec un spectre de lumière arbitraire. De plus, SCAPS-1D offre la possibilité de moduler l'épaisseur, ainsi que les propriétés optiques et électriques d'une couche en fonction de la concentration atomique de ses éléments constitutifs [16].

### III.6.4 Environnement de SCAPS-1D

#### III. 6.4.1 La signification des blocs

L'interface de SCAPS-1D est constituée d'un ensemble de panneaux graphiques facilitant l'accès aux différentes fonctionnalités et options du programme [17].

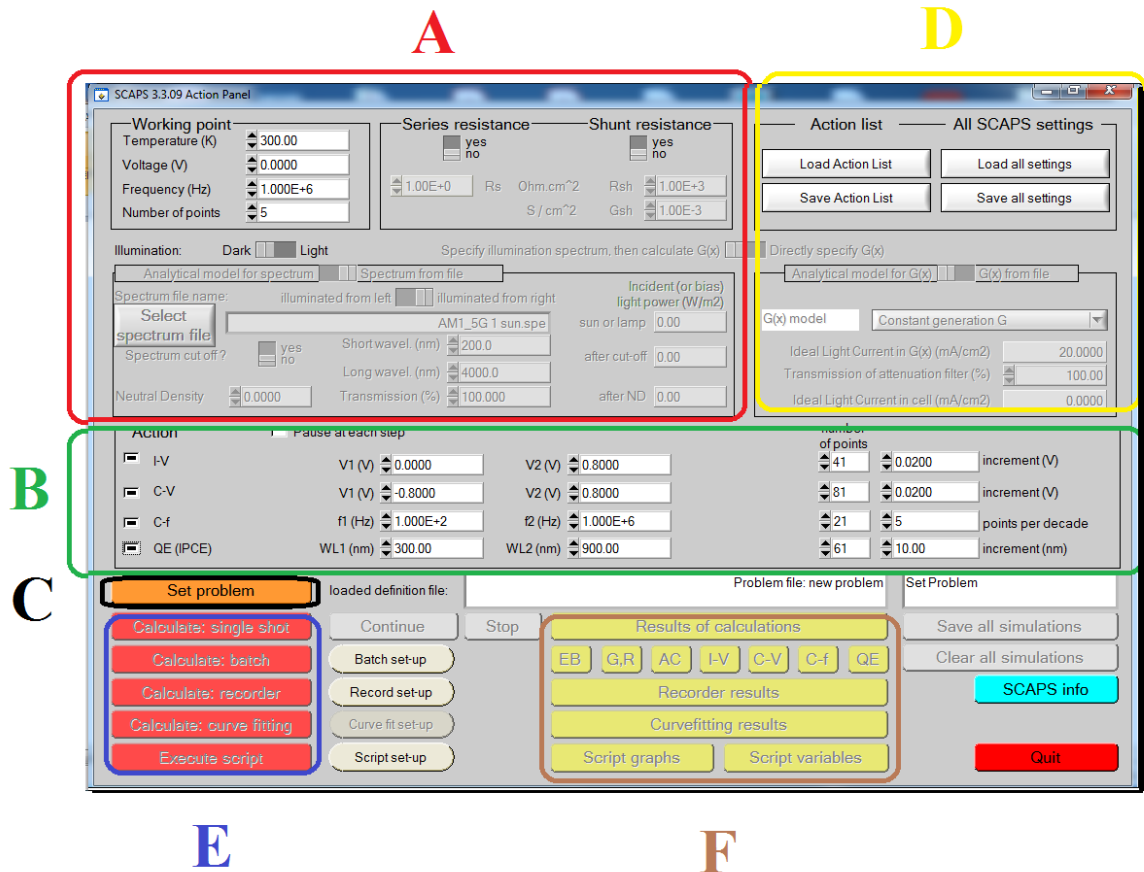


Fig. III.5 Interface utilisateur principale de SCAPS-1D (version 3.3.09).

La figure III.5 illustre le panneau de définition de SCAPS-1D (version 3.3.09) utilisé dans cette étude, permettant à la fois de configurer les conditions de simulation et d'exécuter des tâches spécifiques.

Ce panneau se compose de six sections principales :

**A. Paramètres de simulation** : définition des conditions environnementales telles que la température, la tension de polarisation, la fréquence, les résistances parasites, le spectre lumineux et le maillage.

**B. Sélection des caractéristiques de la cellule** : choix des paramètres à analyser, notamment les courbes courant-tension (J-V), capacité-tension (C-V), capacité-fréquence (C-f) et rendement quantique (Q-E), pour évaluer la performance de la cellule solaire.

**C. Définir le problème** c.-à-d. la définition de la structure de la cellule : configuration détaillée des différentes couches, interfaces et contacts.

**D. Enregistrement des paramètres** : sauvegarde des fichiers sources contenant les données de simulation.

**E. Lancement des calculs** : Exécution des simulations.

**F. Affichage des résultats** : Visualisation des sorties numériques et graphiques des simulations effectuées.

La configuration des blocs du logiciel est décrite dans le texte. Des interfaces dédiées permettent d'accéder aux fonctionnalités essentielles.

### III. 6.4.2 Lancement du SCAPS-1D

Pour lancer le logiciel SCAPS, deux méthodes sont possibles : soit en cliquant sur l'icône correspondante située sur le bureau, soit en effectuant un double-clic sur le fichier exécutable nommé **SCAPS3309.EXE** (ou tout autre fichier correspondant à une version différente de SCAPS) depuis le gestionnaire de fichiers. Une fois exécuté, le logiciel s'ouvre en affichant le panneau d'action principal, qui constitue l'interface de départ permettant d'accéder aux différentes fonctionnalités de configuration, de simulation et d'analyse du dispositif photovoltaïque.



### III. 6.4.3 Définir le problème

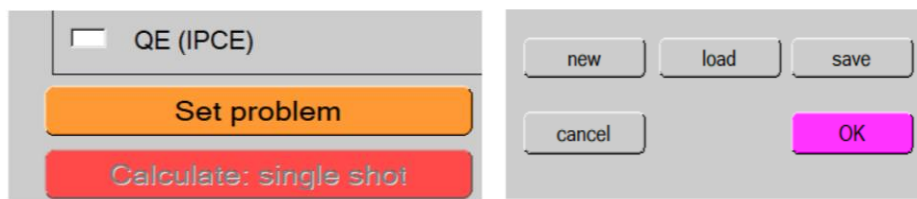


Fig. III.6 Définir le problème, la géométrie, les matériaux et les propriétés de la cellule solaire étudiée.

Pour configurer le problème de simulation dans SCAPS, il est nécessaire de définir la géométrie de la cellule solaire, les matériaux utilisés dans chaque couche, ainsi que l'ensemble des propriétés physiques et électroniques (épaisseurs, dopages, mobilités, constantes diélectriques, niveaux de recombinaison, etc.). Pour ce faire, il faut cliquer sur le bouton "**Set problem**" dans le panneau d'action principal du logiciel. Une nouvelle fenêtre s'ouvre, permettant de charger un fichier de définition préalablement sauvegardé. Dans le coin inférieur droit de cette nouvelle fenêtre, cliquez sur le bouton "**Load**" (voir fig. III.6). Une boîte de dialogue s'affiche alors pour vous permettre de naviguer dans votre répertoire de fichiers. Sélectionnez et ouvrez un fichier de configuration, tel que par exemple "**NUMOS\_CIGS\_Baseline.def**". Ce fichier constitue un exemple type de structure de cellule solaire à base de CIGS ( $\text{Cu(In,Ga)Se}_2$ ), contenant déjà des paramètres par défaut pour l'ensemble des couches constitutives de la cellule : couche absorbante, couche tampon, fenêtre et contacts. Une fois ce fichier chargé, tous les paramètres du dispositif apparaissent

dans les différents onglets de configuration. Nous pouvons alors les modifier, les adapter ou les affiner selon nos besoins spécifiques avant de procéder à la simulation.

### III. 6.4.4 Définir le point de fonctionnement

Définir le point de fonctionnement signifie spécifier les conditions dans lesquelles la simulation sera effectuée. Ce point correspond aux paramètres qui restent constants pendant la simulation et qui caractérisent les conditions de mesure du dispositif.

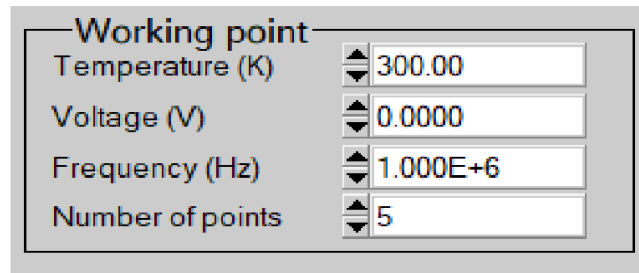


Fig. III.7 Le point de fonctionnement.

Ces paramètres incluent :

- **Température (T) :**

La température est un paramètre essentiel dans toutes les simulations. Dans SCAPS, seuls certains paramètres ont une dépendance thermique explicite :

- La densité des états dans les bandes de conduction et de valence  $N_c(T)$ ,  $N_v(T)$ .
- Les vitesses thermiques des porteurs ;
- Le voltage thermique ( $kT$ ), et tous leurs dérivés.

Tous les autres paramètres du matériau doivent être saisis manuellement pour chaque température utilisée dans la simulation. Il n'y a pas de recalcul automatique en fonction de T.

- **Tension (V) :**

La tension n'est pas concernée dans les simulations **J-V** (courant-tension) et **C-V** (capacité-tension), où elle varie automatiquement sur une plage définie. Elle est toutefois cruciale pour :

- Les simulations **C-f** (capacité-fréquence),
- Et **QE( $\lambda$ )** (quantum efficiency spectrale),

Dans ces cas, il s'agit de la tension de polarisation continue (DC) appliquée pendant la mesure. SCAPS commence systématiquement à 0 V, puis atteint la tension de point de fonctionnement selon un nombre d'étapes défini par l'utilisateur.

- **Fréquence ( $f$ )**

La fréquence ne concerne que les simulations **C-V**. Elle est utilisée pour fixer la fréquence de mesure de la capacité du dispositif. Elle n'intervient pas dans les simulations I-V, QE( $\lambda$ ) ou C-f.

- **Illumination**

L'éclairage est un facteur commun à toutes les simulations. Il permet de définir :

- Les conditions lumineuses (obscurité ou lumière),
- Le côté illuminé du dispositif (avant ou arrière),
- Le type de spectre lumineux utilisé.

Le spectre par défaut est celui du soleil standard "**sun**" (équivalent à 1000 W/m<sup>2</sup>) avec un indice de masse d'air de 1.5 global (AM1.5G).

SCAPS propose également une large sélection de sources monochromatiques et de spectres personnalisés pour des analyses plus spécifiques. Par ailleurs, si un simulateur optique externe a été utilisé, il est aussi possible de charger un profil de génération directement, ce qui remplace le besoin d'un spectre lumineux.

### III. 6.4.5 Choix des paramètres de simulation

Dans la section Action du panneau principal de SCAPS, un bloc est dédié à la définition des caractéristiques électriques ou optiques que l'on souhaite simuler. Il permet de choisir une ou plusieurs mesures parmi les suivantes :

- **J-V** (courant-tension) : pour étudier le comportement électrique de la cellule solaire en fonction de la tension appliquée.
- **C-V** (capacité-tension) : pour analyser la variation de la capacité en fonction de la tension, souvent utilisée pour extraire des informations sur les dopages.
- **C-f** (capacité-fréquence) : utile pour évaluer la réponse capacitive du dispositif à différentes fréquences, souvent en lien avec les effets de pièges.
- **QE( $\lambda$ )** (quantum efficiency en fonction de la longueur d'onde) : pour déterminer la capacité de la cellule à convertir les photons incidents en électrons selon leur longueur d'onde.


L'utilisateur peut également ajuster manuellement les valeurs de départ et de fin de la variable balayée (tension, fréquence, longueur d'onde, etc.), ainsi que le nombre de points ou d'étapes entre ces deux extrémités, afin de contrôler finement la résolution et la durée de la simulation.

Ce paramétrage permet de personnaliser les conditions de la simulation selon les besoins de l'étude, et d'obtenir des courbes représentatives du comportement réel du dispositif.

### III. 6.4.6 Lancer le calcul

Une fois tous les paramètres définis (géométrie de la cellule, matériaux, conditions de fonctionnement et caractéristiques à simuler), il est possible de démarrer la simulation.

Pour ce faire, on utilise le bouton "**Calculate : Signal Shot**" disponible dans le panneau d'action. Ce bouton exécute le calcul selon les conditions et les mesures préalablement choisies (J-V, C-V, C-f, QE( $\lambda$ ), etc.).



Pendant le calcul, SCAPS affiche généralement une barre de progression ou des messages d'état. À la fin de la simulation, les résultats sont automatiquement affichés sous forme de courbes ou de fichiers exploitables pour une analyse plus approfondie.

### III. 6.4.7 Afficher les courbes simulées

Une fois le calcul terminé, SCAPS bascule automatiquement vers le panneau du diagramme de bande d'énergie, illustré dans la figure III.8. Ce panneau permet de visualiser plusieurs résultats clés au dernier point de polarisation simulé, notamment :

- Les diagrammes de bandes d'énergie.
- Les densités des porteurs libres (électrons et trous).
- La densité de courant dans la cellule.

Si l'on souhaite observer les résultats à des points intermédiaires de polarisation, il est possible d'utiliser la commande "**Pause**" dans le panneau d'action pendant la simulation.

Pour afficher ou enregistrer les résultats, plusieurs options sont disponibles :

- **PRINT** : pour imprimer les résultats affichés,
- **SAVE GRAPHS** : pour sauvegarder les graphes sous forme d'images ou de fichiers,
- **SHOW** : pour visualiser les courbes ou les données numériques à l'écran.

Les données affichées peuvent être copiées/collées dans des logiciels comme Excel pour une analyse ou une présentation plus poussée. Il est également possible de sauvegarder les résultats dans des fichiers de données structurés.

Enfin, si vous avez défini des panneaux personnalisés pour certaines mesures (J-V, C-V, QE, etc.), vous pouvez à tout moment y accéder afin d'examiner les courbes spécifiques liées à chaque type de caractérisation.

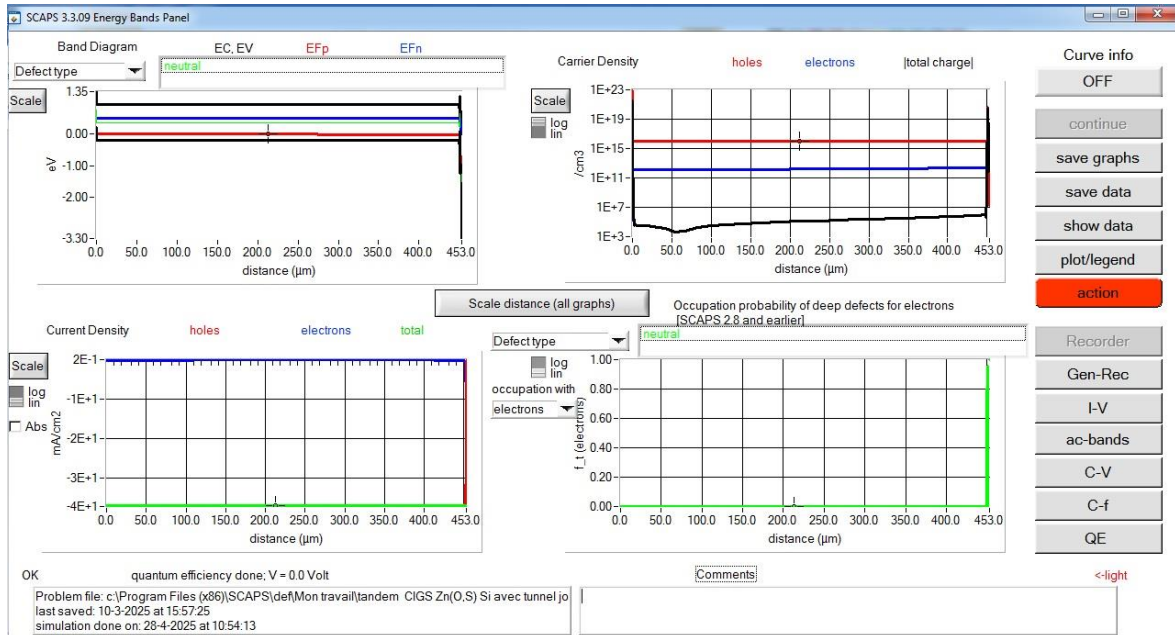


Fig. III.8 Panneau des bandes d'énergie.

### III. 6.4.8 Affichage des courbes J–V

La figure III.9 illustre le panneau d'affichage des courbes J–V, à la fois en obscurité et sous éclairage (AM 1.5 ou autre spectre sélectionné). Ce panneau permet de visualiser les caractéristiques courant-tension (J–V) de la cellule solaire simulée.

La courbe la plus récente calculée est automatiquement mise en évidence par une couleur spécifique, facilitant son identification dans un graphe pouvant contenir plusieurs courbes superposées. Lorsque le graphique devient trop chargé, il est conseillé d'utiliser le bouton "**CLEAR ALL GRAPHS**" dans le panneau d'action pour effacer toutes les courbes précédemment affichées.

Il est à noter que les courbes des taux de recombinaison ne sont affichées que pour la dernière simulation effectuée. Chaque courbe possède une légende colorée correspondant à sa teinte dans le graphe.

Pour accéder aux détails d'une courbe, activez l'option "**CURVE INFO**". En cliquant sur une courbe, un panneau contextuel (pop-up) s'affiche, fournissant des informations détaillées sur le graphique, la courbe sélectionnée, ainsi que les valeurs du point spécifique cliqué (tension, courant, etc.).

Le bouton "**SCALE**" permet d'ajuster l'échelle et les plages des axes pour une meilleure lisibilité. Il est également possible de faire un zoom interactif :

- En maintenant la touche **CTRL** enfoncée tout en traçant un rectangle de sélection dans la zone du graphe, on effectue un zoom avant (agrandissement) sur cette portion.

- En appuyant sur **CTRL + clic droit**, on effectue un zoom arrière (zoom out), permettant de revenir à une vue plus globale.

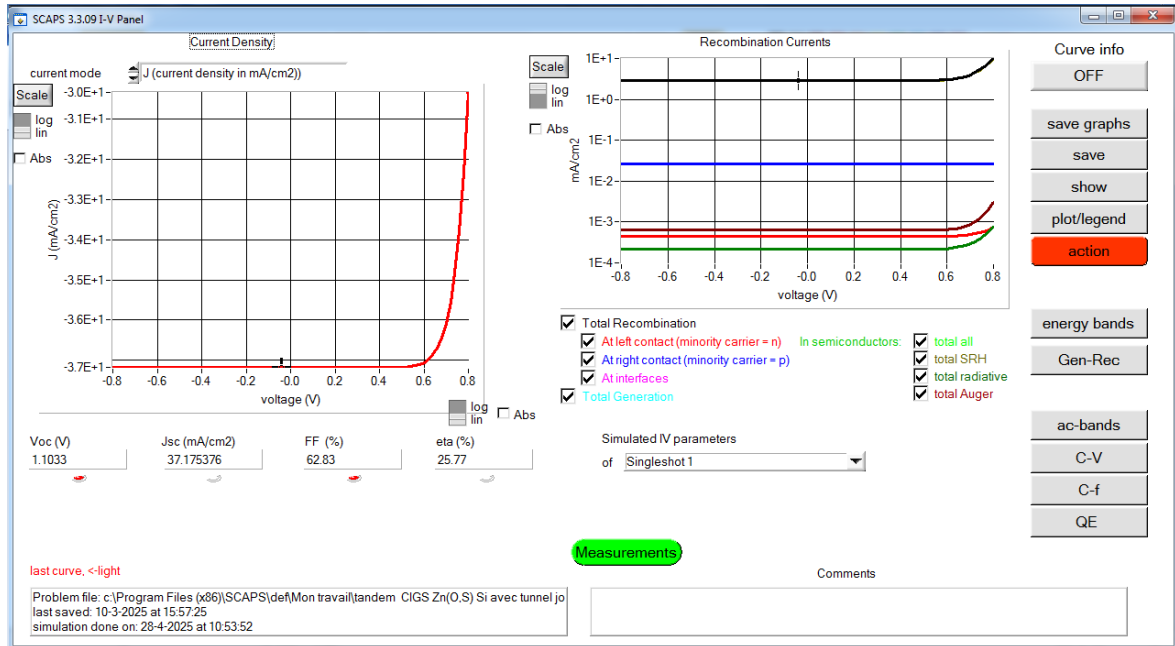


Fig. III.9 Panneau d'affichage des courbes I-V

### III. 7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons exploré de manière approfondie les concepts fondamentaux de la modélisation et de la simulation, en particulier dans le contexte scientifique et technique. Nous avons d'abord précisé ce qu'est la modélisation, en distinguant ses deux principales approches : numérique et analogique. La modélisation numérique repose sur des équations mathématiques et leur résolution par des algorithmes, tandis que la modélisation analogique s'appuie sur des systèmes physiques ou électroniques qui reproduisent le comportement étudié.

Nous avons ensuite montré que la modélisation joue un rôle essentiel dans plusieurs disciplines comme la physique, l'informatique, la biologie, et bien d'autres sciences de la vie. Elle permet de formaliser des phénomènes complexes pour en faciliter l'analyse, l'optimisation et la prédiction.

La notion de simulation, quant à elle, a été définie comme le processus qui permet d'exécuter un modèle afin d'observer et d'analyser son comportement dans des conditions données. Nous avons distingué plusieurs types de simulations (statique, dynamique, déterministe, stochastique), et souligné leurs avantages, notamment en termes de réduction des coûts expérimentaux, de gain de temps, et de sécurité.

Par la suite, nous avons introduit les notions de conception des systèmes, en insistant sur la description hiérarchique, les niveaux d'abstraction, la spécification fonctionnelle et le flot de conception, qui constituent les étapes clés dans la modélisation de dispositifs électroniques et optoélectroniques.

Enfin, une attention particulière a été portée au logiciel SCAPS-1D, un outil de simulation numérique dédié à l'étude des cellules solaires multicouches. Après une présentation générale de son interface et de son environnement, nous avons détaillé son modèle physique basé sur les équations de Poisson et de continuité. Nous avons aussi présenté les différentes étapes de prise en main du logiciel : depuis le lancement, la définition du problème, le choix du point de fonctionnement, jusqu'au lancement des calculs et l'affichage des résultats (courbes J–V, recombinaison, profils de bande, etc.).

Ainsi, ce cadre théorique établit une base solide pour la mise en œuvre de simulations numériques avancées avec SCAPS-1D. Il prépare le terrain pour des études plus poussées sur les performances des cellules solaires, leur optimisation structurelle, et l'analyse fine des phénomènes de transport de charge dans les dispositifs semi-conducteurs.

### III.8 Références bibliographiques du Chapitre III

- [1] M. El-Saba, Cours pédagogique, Université d'Ain-Shams, le Caire, Égypte, 2010.
- [2] <https://www.futura-sciences.com/sciences/definitions/sciences-modelisation-11321/> (Dernier accès, le 14.02.2025).
- [3] <http://www.scmsa.com/model.htm#parag1> (Dernier accès, le 14.02.2025).
- [4] P. A. Fishwick, Simulation Model Design and Execution: Building Digital Worlds. Prentice Hall, 1995.
- [5] J. Banks, J. S. Carson, B. L. Nelson, D. M. Nicol, Discrete-Event System Simulation. Pearson, 2010.
- [6] B. P. Zeigler, H. Praehofer, T. G. Kim, Theory of Modeling and Simulation: Integrating Discrete Event and Continuous Complex Dynamic Systems. Academic Press, 2000.
- [7] S. Jain, Modeling & Simulation in Engineering, International Journal of Scientific Research and Management (IJSRM) 1(5) 234-245, 2013.
- [8] Cours pédagogique, pour les étudiants de 2<sup>ième</sup> année Master, Microélectronique, Université de Jijel, 2021.
- [9] <https://circuit-artists.com/top-down-or-bottom-up-where-should-designs-begin> (Dernier accès, le 17.02.2025).
- [10] Cours pédagogique, pour les étudiants de 2<sup>ième</sup> année Master, Microélectronique, Université de Mohamed Boudiaf de M'sila, 2025.
- [11] M. Burgelman, et al., Thin Solid. Films, 361 (2000) 527–532.
- [12] A. Niemegeers, M. Burgelman, in the 25<sup>th</sup> IEEE Photovoltaic Specialists Conference, Washington DC (1996) 901–904.
- [13] S. M. Sze, K. K. Ng, Physics of Semiconductor Devices (3<sup>ième</sup> ed.) Wiley-Interscience (2006)
- [14] D. A. Neamen, Semiconductor Physics and Devices (4<sup>ième</sup> ed.) McGraw-Hill Education (2012)
- [15] H. Mathieu, H. Fanet, Physique des semiconducteurs et des composants électroniques (6<sup>ième</sup> ed.) DUNOD (2009)
- [16] F. X. Abomo-Abega, Academic thesis, Université de Yaoundé I, 2022.
- [17] M. Burgelman, Official manual (usually bundled with SCAPS) explaining usage, physical models, and simulation procedures. Department of Electronics and Information Systems, University of Gent.

## Chapitre **IV**

# Résultats et discussions

## IV.1 Introduction

Les cellules solaires CIGS offrent une puissance spécifique (power-to-weight ratio) allant jusqu'à 919 W/Kg, ce qui est élevé parmi tous les types de cellules solaires. Récemment, le Centre de recherche sur l'énergie solaire et l'hydrogène (ZSW) [1] et le Laboratoire national des énergies renouvelables (NREL) [2] ont rapporté un rendement de 20.3 et 19.9 % respectivement pour les cellules solaires en film mince CIGS avec une surface active de 0.5 cm<sup>2</sup>. Il a également été rapporté que les films minces de CIGS ont démontré une énergie de bande interdite réglable de 1.04 à 1.68 eV avec un contenu en Ga variant de  $x = 0$  à 1 [3]. Une étude théorique sur la cellule tandem CIGS/CIS a été rapportée par Kim et al. Avec un rendement de 26.7 % [4]. Nacer et al. ont rapporté des investigations optimisées sur le couplage de courant des cellules solaires à double jonction InGaN/Si avec un rendement de 38.3 % [5]. Des conceptions novatrices de cellules tandem CZTS/Si et chalcopyrite/Si ont récemment été rapportées avec des rendements de 22.9 et 19.8 %, respectivement, par L. Aimin [6] et Kim et al. [7].

Dans le travail actuel, les rendements potentiels des cellules tandem CIGS/Si sont abordés à l'aide de l'outil de simulation SCAPS-1D. Tout d'abord, des simulations des caractéristiques courant-tension ( $J-V$ ) et du rendement quantique externe (EQE) ont été réalisées dans des conditions indépendantes, ainsi qu'en fonction de différentes épaisseurs des couches d'absorbeur et de tampon pour les cellules à jonction unique CIGS et c-Si. Ensuite, conformément aux résultats obtenus, l'étude a été élargie à la structure CIGS en analysant l'effet de la variation de la concentration  $x$  dans l'alliage  $\text{Cu}(\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x)\text{Se}_2$  sur les performances de la cellule. Par la suite, la structure tandem CIGS/Si a été simulée à l'aide d'une jonction tunnel intercalée entre les deux cellules, et des améliorations significatives du rendement par rapport aux cellules simples ont été observées. Enfin, l'influence de la température de fonctionnement sur les performances globales de la cellule tandem a été étudiée, mettant en évidence la robustesse de la conception face aux variations thermiques. D'un point de vue théorique, SCAPS-1D repose sur la résolution auto-cohérente de l'équation de Poisson et des équations de transport (drift-diffusion) pour les électrons et les trous. Il inclut également les mécanismes de recombinaison de type Shockley-Read-Hall (SRH) dans le volume et aux interfaces, la génération optique via l'absorption spectrale, ainsi que les effets de température sur les paramètres électroniques (mobilité, bande interdite, concentrations intrinsèques, etc.). Ces équations permettent de modéliser fidèlement le

comportement électrique et optique des cellules solaires, en tenant compte des propriétés physiques des matériaux utilisés (Voir la Section III.6.3).

## IV.2 Structure et paramètres d'une cellule solaire

La transition énergétique actuelle impose un recours accru aux énergies renouvelables, notamment l'énergie solaire, dont l'exploitation efficace reste un défi technologique majeur. Dans ce contexte, les cellules solaires tandem représentent une avancée prometteuse, visant à dépasser les limites de rendement des cellules photovoltaïques classiques à jonction unique. En combinant deux matériaux absorbeurs aux propriétés complémentaires, ces structures permettent une conversion plus efficace du spectre solaire. Parmi les combinaisons tandem les plus étudiées, l'association du CIGS ( $\text{Cu(In,Ga)Se}_2$ ), un semi-conducteur à bande interdite directe, avec le silicium cristallin (c-Si), matériau standard de l'industrie photovoltaïque, suscite un intérêt croissant. Le CIGS, en tant que cellule supérieure, capte principalement les photons de haute énergie (visible à UV), tandis que le silicium, en cellule inférieure, absorbe efficacement les photons de plus basse énergie (infrarouge proche). Cette complémentarité spectrale permet d'envisager des rendements dépassant 30 %, tout en exploitant des technologies matures.

La structure conçue de notre cellule tandem CIGS/c-Si proposé est montrée dans la Fig. IV.1. Le CIGS, ayant une grande bande interdite de 1.69 eV, a été utilisé comme cellule supérieure, tandis que le c-Si, avec une bande interdite plus faible de 1.16 eV, a été utilisé comme cellule inférieure. L'épaisseur de la cellule supérieure a été maintenue plus petite par rapport à celle de la cellule inférieure [1]. Le dispositif photovoltaïque avec des sous-cellules absorbantes complémentaires supérieures et inférieures ayant différentes bandes interdites a été utilisé pour absorber les photons incidents de haute énergie.

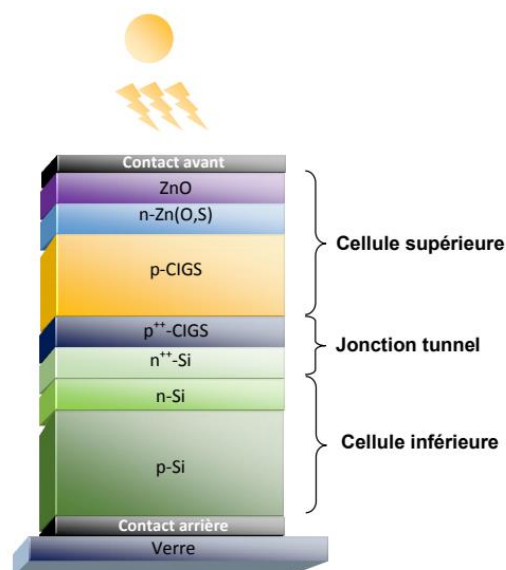


Fig. IV.1 Schéma de la cellule solaire tandem CIGS/Si à deux terminaux proposée avec jonction tunnel.

En général, les critères de sélection pour ces cellules seraient que la cellule inférieure peut générer des courants élevés avec une faible tension en circuit ouvert par rapport à la cellule supérieure [8]. La cellule tandem chalcopyrite-sur-silicium est composée de ZnO/n-Zn(O,S)/p-CIGS en haut et n-Si/p-Si en bas, utilisant une intégration monolithique à deux terminaux (2-T). Dans une cellule tandem avec deux terminaux, il doit y avoir un contact ohmique entre deux cellules consécutives. Les contacts ohmiques internes ( $I_{CO}$ ) présentent certaines propriétés novatrices telles qu'une conductivité plus élevée et une transparence optique, bien que la densité de courant de court-circuit élevée soit l'une des propriétés les plus significatives des  $I_{oc}$ . Les  $I_{oc}$  peuvent être préparés par deux méthodes : la première méthode est les jonctions à tunnel (ou diodes à tunnel ou couches de recombinaison), et la seconde est les interconnexions métalliques. Cependant, cette dernière méthode peut être évitée en raison de son traitement complexe et de son mauvais rendement du dispositif [9]. Comme mentionné précédemment, la cellule c-Si (cellule inférieure) et le CIGS (cellule supérieure) sont connectés par une jonction à tunnel délimitée par deux régions P et N, avec des concentrations de dopage élevées [ $P^{++}$  - CIGS /  $n^{++}$  - Si].

Les investigations sur les performances de cette cellule solaire tandem ont été réalisées à l'aide de l'outil Solar Cell Capacitance Simulator (SCAPS-1D, version 3.3.06) sous illumination AM1.5. SCAPS-1D a été développé au Département d'électronique et de systèmes d'information de l'Université de Gand, en Belgique, et offre sept couches semi-conductrices d'entrée à étudier via une simulation unidimensionnelle [10]. De plus, cet outil est capable de mesurer le biais lumineuse, l'éclairage venant soit du côté n, soit du côté p, le rendement quantique et la conversion d'énergie, la réponse en fréquence, la structure de bande, le facteur de forme, la tension en circuit ouvert et les caractéristiques capacité-tension, la densité de courant de court-circuit, le profil de température, le profil de génération et de recombinaison, la distribution du champ électrique et la performance spectrale [11]. Dans la présente étude, la température de fonctionnement des cellules solaires a été fixée à 300 K. Les paramètres d'entrée utilisés pour la simulation sont donnés dans le Tableau IV.1.

Tableau IV.1 Paramètres d'entrée utilisés pour la simulation avec SCAPS-1D.

Cellule solaire à base de CIGS	p- CIGS	n-ZnO	n-ZnS	ZnO
Epaisseur ( $\mu\text{m}$ ) (optimisé)	2	0.03	0.03	0.01
Gap énergétique (eV)	1.69	3.3	2.26	3.3
Affinité électronique, $E_a$ (eV)	4.8	4.45	3.5	4.45
Permittivité diélectrique relative ( $\epsilon_r$ )	13.6	9	9.67	9
Mobilité des trous, $\mu_p$ ( $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ )	25	25	80	25
Mobilité des électrons, $\mu_n$ ( $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ )	100	100	330	100
Densité des donateurs, $N_D$ ( $\text{cm}^{-3}$ ) (optimisé)	-	$2 \times 10^{18}$	$2 \times 10^{18}$	$1 \times 10^{10}$
Densité des accepteurs, $N_A$ ( $\text{cm}^{-3}$ ) (optimisé)	$1 \times 10^{15}$	-	-	-
<b>Références</b>	<b>[12]</b>	<b>[13]</b>	<b>[13]</b>	<b>[13]</b>

Cellule solaire à base de Si	p - Si	n - Si
Epaisseur ( $\mu\text{m}$ ) (optimisé)	0.45	1
Gap énergétique (eV)	1.12	1.12
Affinité électronique, $E_a$ (eV)	4.05	4.05
Permittivité diélectrique relative ( $\epsilon_r$ )	11.9	11.9
Mobilité des trous, $\mu_p$ ( $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ )	450	450
Mobilité des électrons, $\mu_n$ ( $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ )	1500	1500
Densité des donateurs, $N_D$ ( $\text{cm}^{-3}$ ) (optimisé)	-	$1 \times 10^{16}$
Densité des accepteurs, $N_A$ ( $\text{cm}^{-3}$ ) (optimisé)	$1 \times 10^{15}$	-
<b>Références</b>	<b>[14]</b>	<b>[14]</b>

### IV.3 Résultats de simulation et interprétation physique

L'optimisation des paramètres photovoltaïques pour une cellule solaire tandem CIGS/c-Si a été réalisée dans le but d'améliorer la stabilité et le rendement des dispositifs commerciaux déjà disponibles. Dans un premier temps, les deux structures à base de Si et de CIGS ont été étudiées séparément, chacune sous forme de cellule à jonction unique, afin d'analyser leurs performances individuelles et d'identifier les paramètres critiques. L'optimisation des cellules conçues a été effectuée par des variations d'épaisseur et de concentration  $x$  des couches respectives. Ensuite, deux cellules à jonction unique incorporant une jonction tunnel  $n^{++}\text{-Si} / p^{++}\text{-CIGS}$  ont été étudiées. Enfin, la cellule tandem proposée a été optimisée en ce qui concerne l'épaisseur des couches, le dopage pour différents couche tampons de la cellule supérieure de tandem.

### IV.3.1 Simulation de la structure supérieure basée sur l'empilement n-Zn(S,O)/p-CIGS

Les cellules solaires à couches minces à base de  $\text{Cu(In,Ga)Se}_2$  (CIGS) représentent une technologie prometteuse dans le domaine du photovoltaïque, grâce à leur haut rendement de conversion, leur bonne stabilité à long terme et leur flexibilité d'intégration. Traditionnellement, ces cellules utilisent une couche tampon de CdS déposée par bain chimique (CBD) pour former la jonction hétéro avec l'absorbeur CIGS. Toutefois, le cadmium est un matériau toxique et réglementé, ce qui soulève des préoccupations environnementales et sanitaires.

Afin d'améliorer la compatibilité environnementale de cette technologie tout en maintenant, voire en améliorant, ses performances, des matériaux tampon alternatifs sans cadmium sont actuellement à l'étude. Parmi eux, le  $\text{Zn(O,S)}$  se distingue comme une alternative très prometteuse. Ce composé, formé d'oxysulfure de zinc, présente une bande interdite ajustable (entre 2.8 et 3.6 eV selon la teneur en oxygène), ce qui permet de limiter l'absorption des photons à haute énergie dans la couche tampon et ainsi d'augmenter le photo-courant généré. En plus de sa composition abondante et non toxique. Le  $\text{Zn(O,S)}$  offre une bonne compatibilité avec les couches absorbantes CIGS, notamment grâce à la possibilité d'optimiser l'alignement des bandes de conduction. Plusieurs techniques de dépôt, notamment la pulvérisation cathodique (sputtering), permettent aujourd'hui d'obtenir des couches tampon  $\text{Zn(O,S)}$  de qualité, avec des procédés industriels à faible coût et à haut débit [15].

La structure de base de la cellule solaire supérieure à simple jonctions en CIGS (top cell). Cette configuration de substrat avec une feuille métallique ou du verre sodacalcique en bas et la lumière entrant dans l'absorbeur à travers la couche déposée en haut. Il se compose des couches suivantes de bas en haut : un verre sodacalcique en bas, une couche de contact arrière en Mo métallique, un absorbeur CIGS de type p, une couche tampon de type n, une couche de  $\text{ZnO}$  non dopé (i- $\text{ZnO}$ ), et une couche de fenêtre en  $\text{ZnO}$  conductrice, généralement du  $\text{ZnO}$  dopé à l'aluminium. Cette structure constitue la cellule supérieure dans la cellule tandem CIGS/Si proposée est représentée sur la figure IV.2. L'objectif de cette étape est de comprendre et optimiser le comportement de la cellule supérieure de manière indépendante, avant son intégration dans la structure tandem finale.

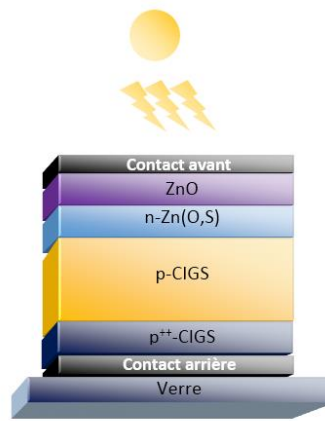


Fig. IV.2 Structure d'une cellule solaire supérieur CIGS (Top-cell).

### IV.3.1.1 L'effets de l'épaisseur des couches n-Zn (O, S) et p-CIGS

La figure (Fig. IV.3) montre l'évolution des paramètres photovoltaïques d'une cellule solaire en fonction de l'épaisseur (Fig. IV.3.a) de la couche p-CIGS ( $\text{Cu(In,Ga)Se}_2$  de type p), et (Fig. IV.3.b) de la couche (Zn (S,O) de type n) dans une architecture de type jonction p-n.

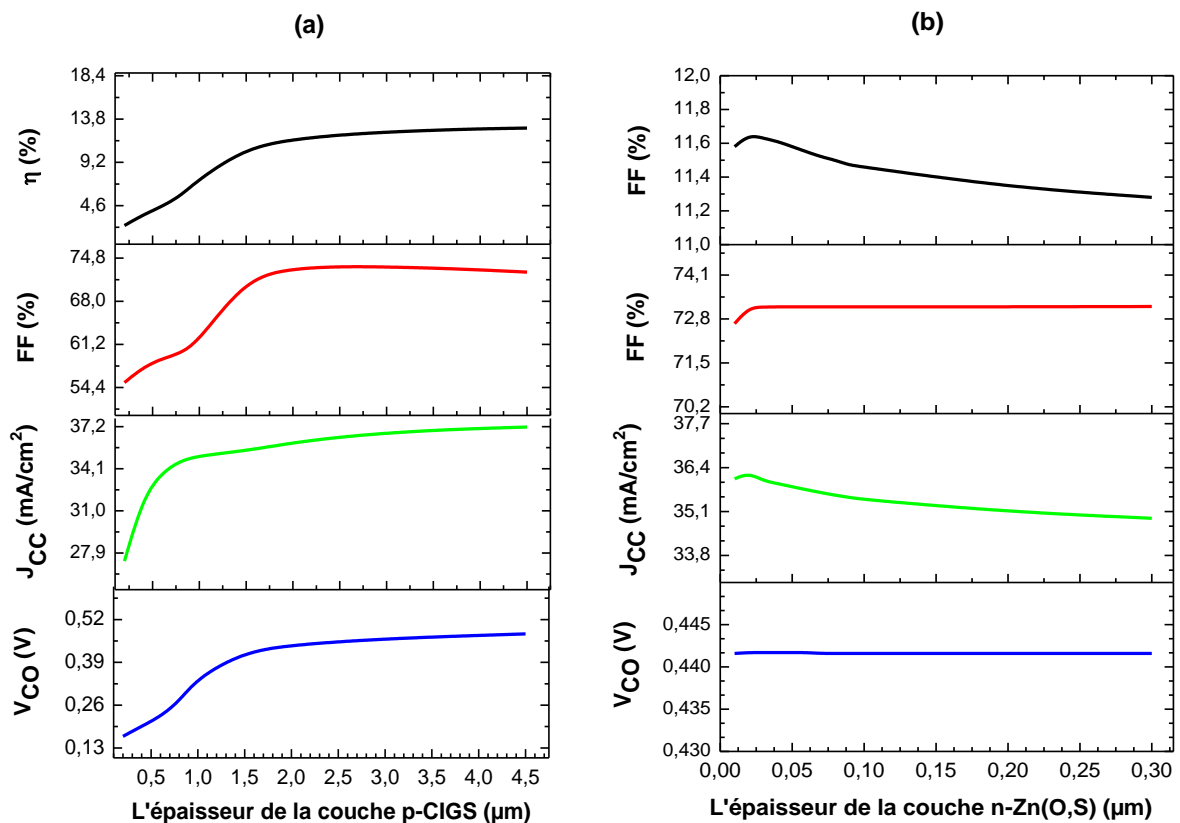


Fig. IV.3 Les paramètres électriques de la cellule supérieure en fonction de l'épaisseur : (a) de la couche d'absorption et (b) de la couche tampon.

Comme présenté dans la figure IV.3.a :

- $V_{CO}$  augmente rapidement avec l'épaisseur jusqu'à saturation.  $V_{CO}$  dépend de la séparation des quasi-niveaux de Fermi, liée à l'équilibre entre génération et recombinaison. Si plus de porteurs sont générés sans augmentation significative de la recombinaison, le niveau de population des porteurs augmente, ce qui augmente  $V_{CO}$ . L'augmentation d'épaisseur peut aussi réduire le champ de fuite optique, stabilisant la jonction.
- $J_{CC}$  augmente avec l'épaisseur de la couche p-CIGS. Ce dernier dépend directement du nombre de photons absorbés dans la couche active. Plus l'épaisseur augmente, plus le matériau absorbe les photons, surtout ceux de faible énergie (proches de l'IR), qui pénètrent plus profondément. Cela entraîne une génération accrue de paires électron-trou. Si les porteurs générés peuvent être collectés efficacement (bonne diffusion et faible recombinaison),  $J_{CC}$  augmente proportionnellement.
- Le FF est une mesure de la "qualité électrique" de la cellule, il reflète la résistance série, la résistance de shunt, et les pertes par recombinaison. Une meilleure récolte des porteurs, un champ électrique fort dans la jonction, et une réduction des pertes ohmiques contribuent à améliorer le FF. Si l'épaisseur supplémentaire ne dégrade pas les propriétés de transport, et que la simulation gère bien les effets parasites, alors FF peut croître.
- Le rendement augmente en fonction de l'épaisseur. Si tous les paramètres clés augmentent ( $J_{CC}$ ,  $V_{CO}$ , FF), alors le rendement augmente mécaniquement. Cela signifie que la cellule est plus efficace pour convertir les photons en électricité, grâce à une optimisation optique (plus d'absorption) et une optimisation électronique (meilleure collecte, moins de pertes).

Tandis que la figure IV.3.b illustre :

- $V_{CO}$  reste constant, Cela indique que l'interface CIGS/Zn(S,O) garde une qualité électronique stable malgré l'augmentation de l'épaisseur. En d'autres termes, les niveaux d'énergie et la recombinaison interfaciale ne changent pas significativement avec l'épaisseur. Cela suggère que la jonction p-n reste efficace dans la séparation des charges, même lorsque le tampon est plus épais.
- $J_{CC}$  est faible avec épaisseur trop fine ( $< 0.03 \mu\text{m}$ ) de tampon. Cela peut engendrer des défauts à l'interface ou une répartition de champ électrique sous-optimale, menant à une collecte de charges incomplète. Après, il y a un équilibre parfait à une épaisseur optimale ( $\sim 0.03 \mu\text{m}$ ), Ensuite,  $J_{CC}$  diminue avec une épaisseur trop grande ( $> 0.03 \mu\text{m}$ ), due à moins de charges atteignent la grille collectrice.

- Le facteur de forme FF stable est constant. Une couche tampon plus épaisse plus la résistance série ( $R_s$ ) du dispositif augmente, ce qui provoque des porteurs traversent une plus grande distance dans un semi-conducteur peu dopé, donc il génère une perte d'énergie.
- À 0.03  $\mu\text{m}$ , la transmission de la lumière vers la couche absorbante, la qualité de l'interface CIGS/tampon, et le transport et la collecte des charges sont optimisés, d'où un rendement maximal. Au-delà, l'absorption optique inutile, la recombinaison accrue, et la résistance série dégradent progressivement le rendement, ainsi la performance de la cellule.

#### IV.3.1.2 L'effet de l'épaisseur du CIGS avec différentes concentrations $x$

L'objectif ultime de l'étude était d'atteindre une fraction  $x$  optimale dans la composition de la cellule  $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ , en plus d'optimiser le bande d'énergie ( $E_g$ ) et l'affinité pour améliorer les performances globales de la cellule. Dans une cellule solaire CIGS, la fraction  $x$  détermine la densité de Gallium dans la structure, qui peut être définie selon l'équation suivante [16, 17] :

$$x = \frac{Ga}{Ga+In} \quad (\text{IV. 1})$$

Les données expérimentales publiées précédemment pour les cellules solaires CIGS ont révélé que la variation de l'affinité et du bande d'énergie ( $E_g$ ) en fonction de la fraction  $x$  peut être formulée selon les équations suivantes [18] :

$$E_g = 1.04 + 0.391x + 0.262x^2 \quad (\text{IV. 2})$$

$$\chi = 4.61 + 1.162x + 0.034x^2 \quad (\text{IV. 3})$$

La Fig. IV.4 montre qu'en accord avec la théorie de la physique des semi-conducteurs, l'affinité de la structure de la cellule diminue à mesure que le bande d'énergie ( $E_g$ ) augmente avec la variation de la fraction  $x$  [19]. Dans une cellule solaire, les deux figures de mérite importantes sont le facteur de forme (FF) et le rendement ( $\eta$ ) de dispositif.

Le  $\eta$  démontre le rendement de conversion de puissance du dispositif, tandis que le FF représente la mesure de la qualité des caractéristiques  $J(V)$  du dispositif et, en général, il a une valeur inférieure à 1. Les équations ci-dessous expriment ces facteurs comme suit :

$$FF = \frac{V_{mP} \times I_{mP}}{V_{CO} \times J_{CC}} \quad (\text{IV. 4})$$

$$\eta = \frac{FF \times V_{CO} \times J_{CC}}{P_{in}} \quad (IV.5)$$

Où  $I_{mP}$  et  $V_{mP}$  représentent le courant et la tension pour atteindre la puissance maximale du dispositif, et  $P_{in}$  représente la puissance des photons incidents déterminée par le spectre de longueur d'onde d'entrée.

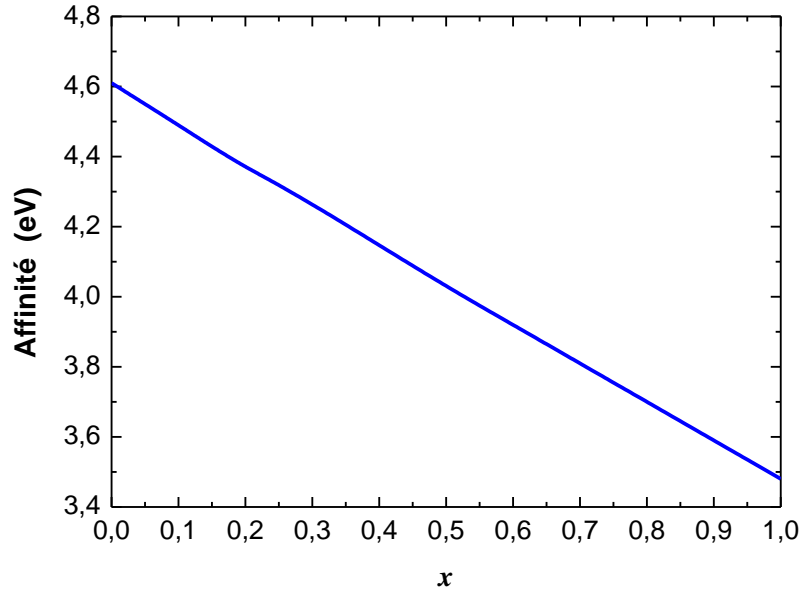


Fig. IV.4. Pourcentage d'affinité, en fonction de la fraction de composition  $x$  pour la cellule solaire.

La Fig. IV.5 montre les caractéristiques  $J(V)$  illuminées de la cellule supérieure CIGS avec différentes concentrations de  $x$  (0.24, 0.33, 0.49 et 0.6 eV) par rapport à l'épaisseur de la couche d'absorption. Tout d'abord,  $V_{CO}$  diminue en fonction de l'augmentation de l'épaisseur, et pour  $x \geq 0.49$ ,  $V_{CO}$  continue de diminuer jusqu'à ce que l'épaisseur de la couche d'absorption atteigne  $0.7 \mu\text{m}$ , puis stabilise par la suite, comme le montre la Fig. IV.5.a, en raison de la relation directe entre  $V_{CO}$  et la largeur de bande, où  $V_{CO} = 1/q \times E_g$ , où  $q$  représente la charge élémentaire [20].

De plus, les simulations ont révélé que  $J_{CC}$  augmente en fonction de l'épaisseur de la couche d'absorption ; cependant, la croissance en fonction de la fraction  $x$  est légèrement lente, comme le montre la Fig. IV.5.b. Le facteur de forme (FF) augmente avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche d'absorption et diminue pour  $x \leq 0.6$ , comme le montre la Fig. IV.5.c. La Fig. IV.5.d montre que les rendements de la cellule solaire CIGS augmentent jusqu'à une épaisseur de  $1 \mu\text{m}$  ; au-delà de ce point, les rendements commencent clairement à diminuer avec l'augmentation de la fraction  $x$ .

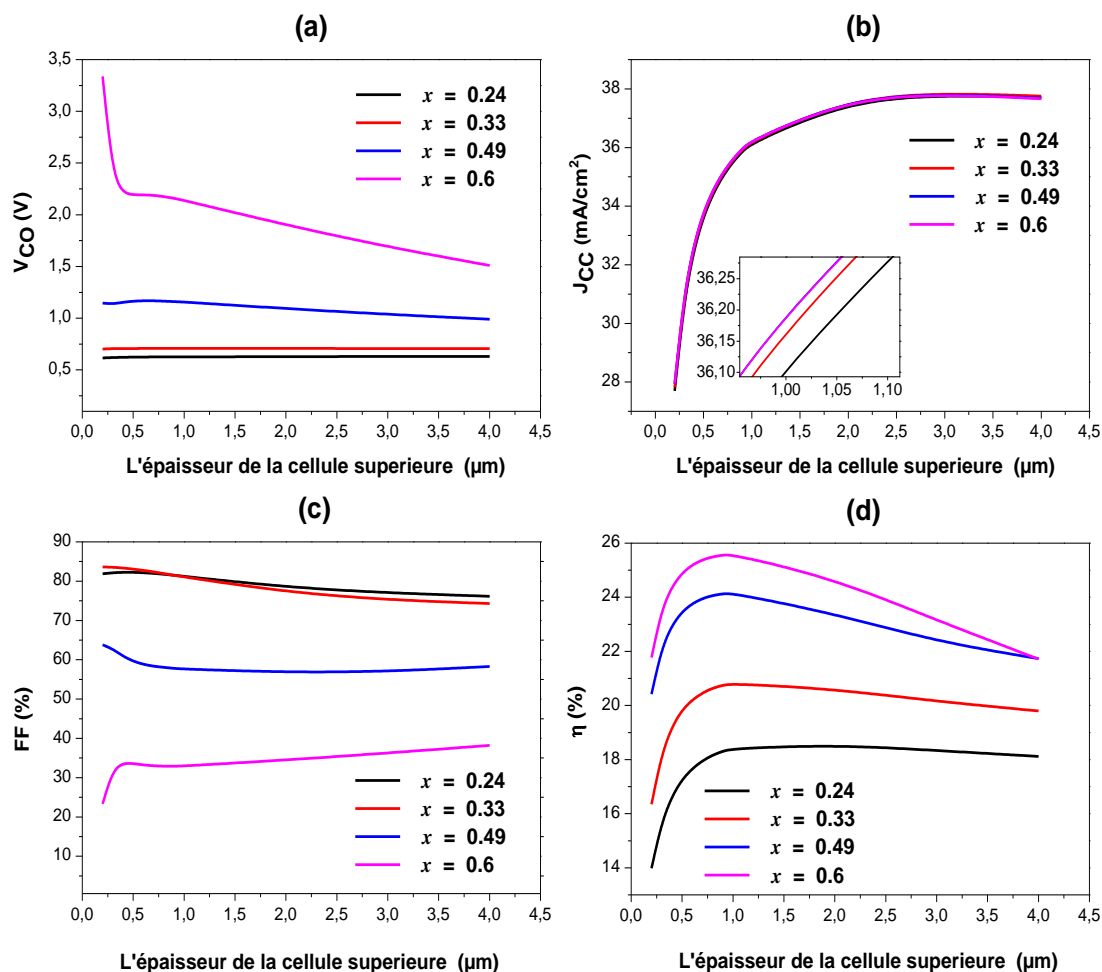


Fig.IV.5 Paramètres électriques simulés du CIGS ( $x = 0.24, 0.33, 0.49$  et  $0.6$ ) en fonction de leur épaisseur d'absorbeur : (a)  $V_{co}$ , (b)  $J_{cc}$ , (c) FF et (d)  $\eta$ .

### IV.3.2 Simulation de la structure inférieure basée sur l'empilement n-Si/p-Si

La cellule solaire inférieure a été modélisée à partir d'une structure simple de type n-Si/p-Si, représentant une jonction PN classique en silicium cristallin. Le silicium est particulièrement bien adapté au rôle de cellule inférieure (Bottom-cell) dans les structures tandem en raison de sa bande interdite relativement faible (environ 1.1 eV), qui lui permet d'absorber efficacement la partie infrarouge du spectre solaire. La cellule en silicium joue un rôle essentiel dans l'amélioration de la conversion énergétique globale de tandem. Cette étude s'intéresse à l'intégration de la cellule solaire en silicium dans une architecture tandem CIGS /Si, en mettant en lumière ses avantages, ses contraintes technologiques et les défis liés à l'optimisation de l'interface entre les deux sous-cellules.

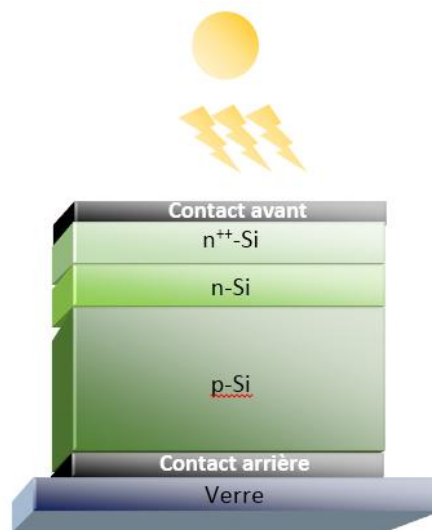


Fig. IV.6 Structure d'une cellule solaire inferieure Si (Bottom-cell).

#### IV.3.2.1 L'effet de l'épaisseur des couches n-Si et p-Si

La figure (Fig. IV.7) montre l'évolution des paramètres photovoltaïques d'une cellule solaire en fonction de l'épaisseur (Fig. IV.7.a) de la couche p-Si (silicium de type p), et (Fig. IV.7.b) de la couche n-Si (silicium de type n) dans une architecture de type jonction p-n.

La figure IV.7.a permet d'observer que :

- $V_{CO}$  reste relativement constante. La tension en circuit ouvert dépend surtout des propriétés de la jonction et des recombinaisons de surface, peu influencées par l'épaisseur de la base p-Si dans cette gamme.
- $J_{CC}$  augmente rapidement avec l'épaisseur jusqu'à saturation. Plus d'épaisseur signifie plus d'absorption alors plus de paires électron-trou générées donc plus de courant. La saturation indique que presque toute la lumière utilisable est déjà absorbée à partir d'une certaine épaisseur ( $\sim 300 \mu\text{m}$  ici).
- Le facteur de forme FF augmente légèrement avec l'épaisseur, puis devient presque constant. Cela montre une amélioration du comportement diode (moins de perte série ou meilleure passivation), mais l'effet est limité.
- Le rendement augmente avec l'épaisseur de la couche p-Si, puis tend à se stabiliser. Une plus grande épaisseur permet une meilleure absorption de la lumière, ce qui augmente la génération de porteurs. Mais au-delà d'un certain point, les gains deviennent marginaux car l'absorption est déjà suffisante.

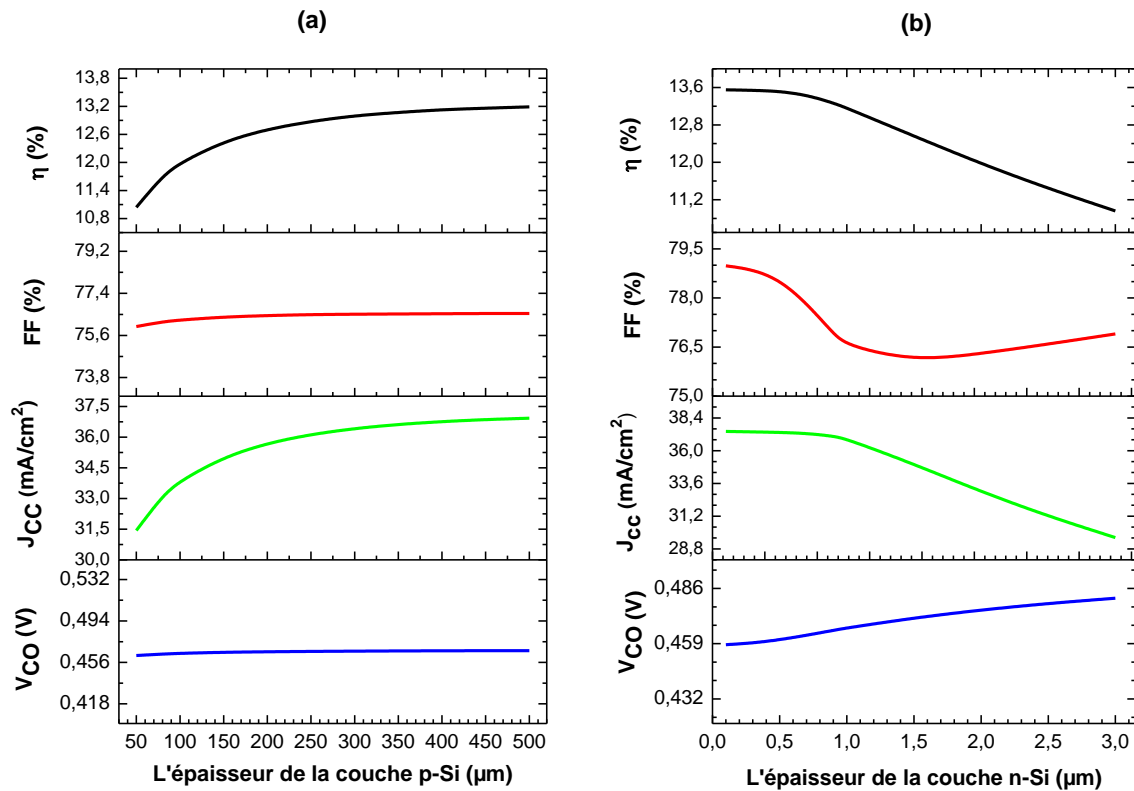


Fig. IV.7 Les paramètres électriques de la cellule inférieure en fonction de l'épaisseur : (a) de la couche d'absorption et (b) de la couche tampon.

Et la figure (Fig. IV.7.b) montre que :

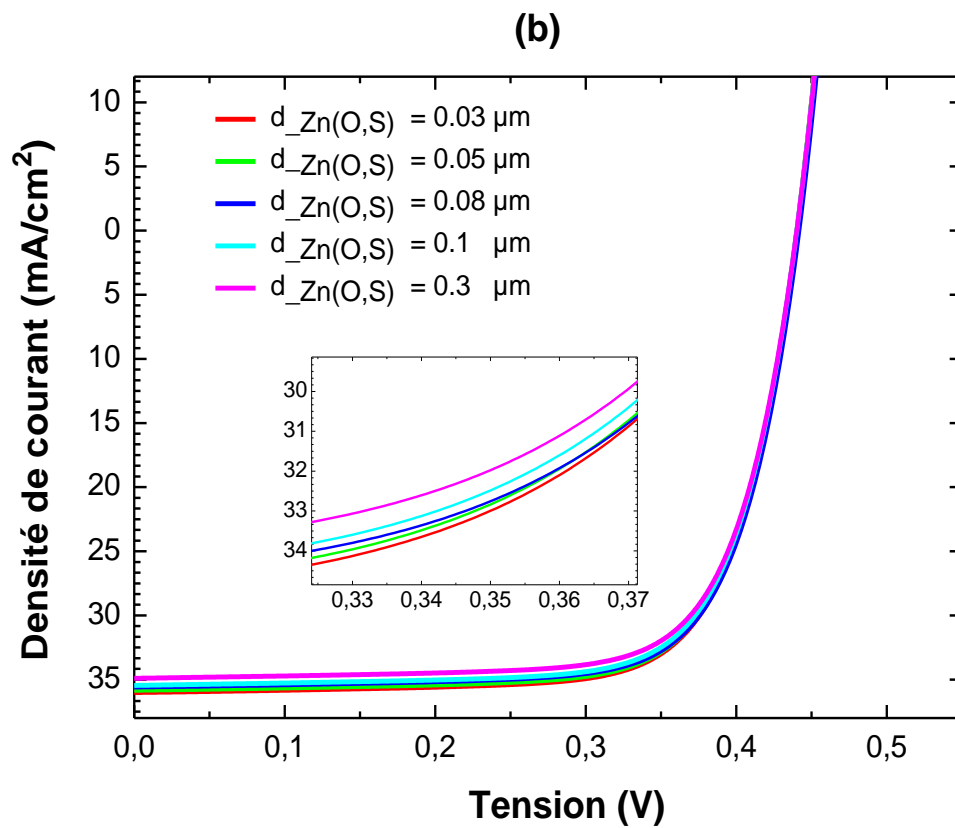
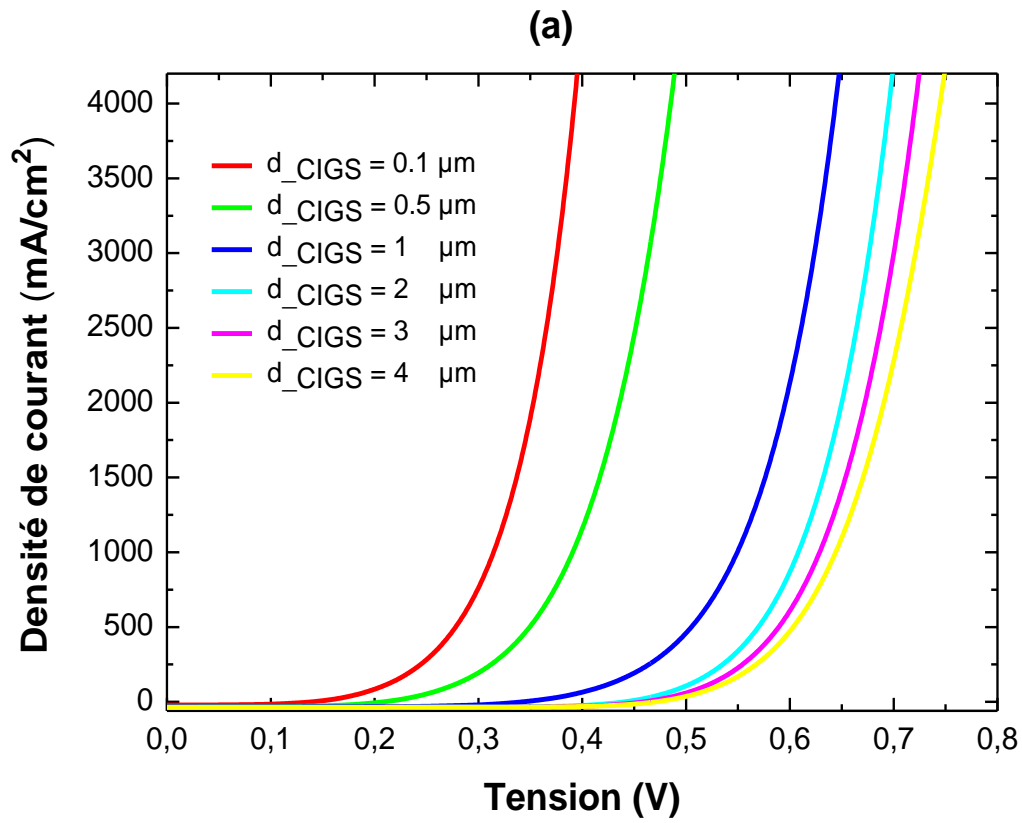
- $V_{CO}$  augmente légèrement avec l'épaisseur. Cette augmentation peut être due à une réduction des recombinaisons de surface ou à un meilleur alignement des bandes, mais ce gain reste limité par les pertes internes.
- $J_{CC}$  diminue légèrement avec l'épaisseur. Cela peut paraître contre-intuitif car une couche plus épaisse absorbe plus de lumière. Toutefois, l'augmentation des recombinaisons volumétriques dans le silicium n-type peut contrebalancer ce gain, surtout si le dopage ou la qualité du cristal n'est pas optimal.
- Le facteur de forme FF diminue initialement, atteint un minimum puis remonte légèrement. Cette variation peut être liée à un compromis entre la résistance série (qui augmente avec l'épaisseur) et la recombinaison aux interfaces.
- Le rendement diminue progressivement avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche n-Si. On possède que l'épaisseur trop importante peut entraîner des pertes par recombinaison dans le volume, ce qui réduit la quantité de charges collectées, malgré une meilleure absorption.

### IV.3.2.2 L'effet de l'épaisseur des couches sur les caractéristiques J(V) et EQE

L'effet de la variation de l'épaisseur des couches d'absorption et de tampon sur les caractéristiques J(V) ainsi que les courbes de rendement quantique externe (EQE) pour les cellules supérieure CIGS et inférieure Si a été montrées dans la Fig. IV.8 et Fig. IV.9, respectivement. L'EQE pour une cellule photovoltaïque est le rapport du courant de court-circuit  $J_{CC}(\lambda)$  et du flux de photons incidents  $\varphi_0(\lambda)$  à une énergie particulière, multiplié par la charge  $q$  des électrons [21].

$$EQE(\lambda) = \frac{J_{sc}(\lambda)}{\varphi_0(\lambda)} \quad (IV.6)$$

Les Fig. IV.8.a et IV.9.a illustrent que, pour les deux cellules, les densités de courant J(V) diminuent en fonction de l'épaisseur de la couche d'absorption. Cependant, les densités de courant pour la couche de tampon augmentent avec l'augmentation de l'épaisseur, comme montré dans les Fig. IV.8.b et IV.9.b. L'effet de l'augmentation de l'épaisseur de la couche d'absorption a entraîné une EQE plus élevée pour les deux cellules, comme indiqué dans les Fig. IV.8.c et IV.9.c. Cette augmentation de l'EQE est significative à des longueurs d'onde plus élevées. En revanche, lorsque l'épaisseur de la couche de tampon est augmentée, on observe une diminution relative de l'EQE, comme représenté dans les Fig. IV.8.d et IV.9.d. L'augmentation significative de J(V) et de l'EQE tend à se saturer à des valeurs d'épaisseur plus élevées pour les longueurs d'onde plus longues, car les photons incidents à courtes longueurs d'onde sont absorbés près de la surface [22].



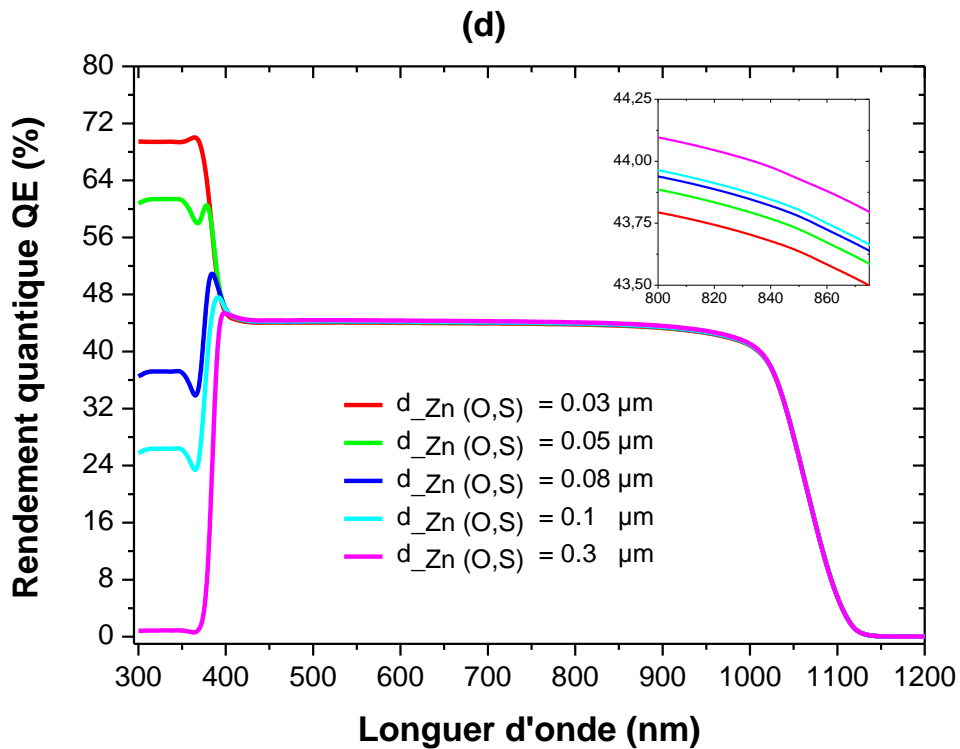
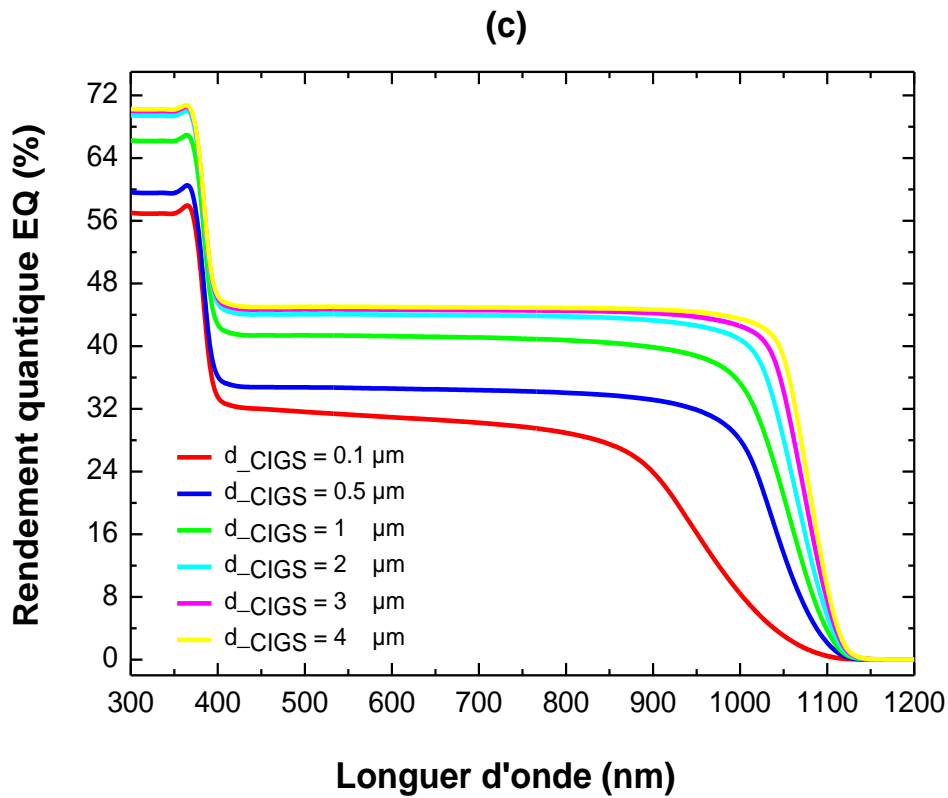
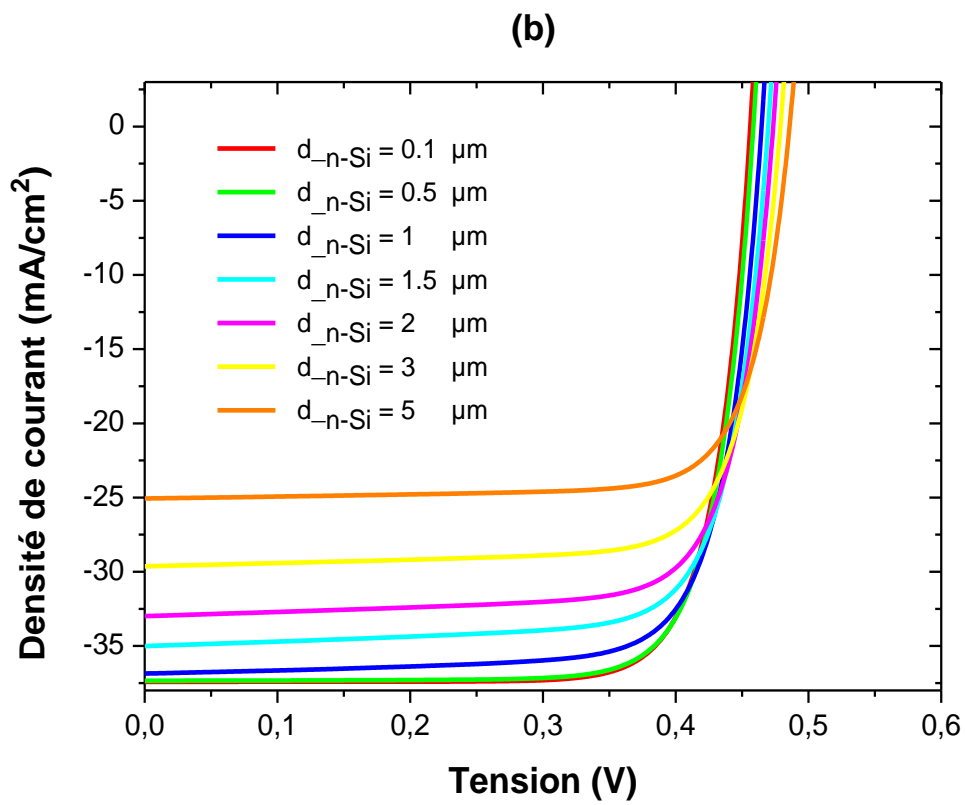
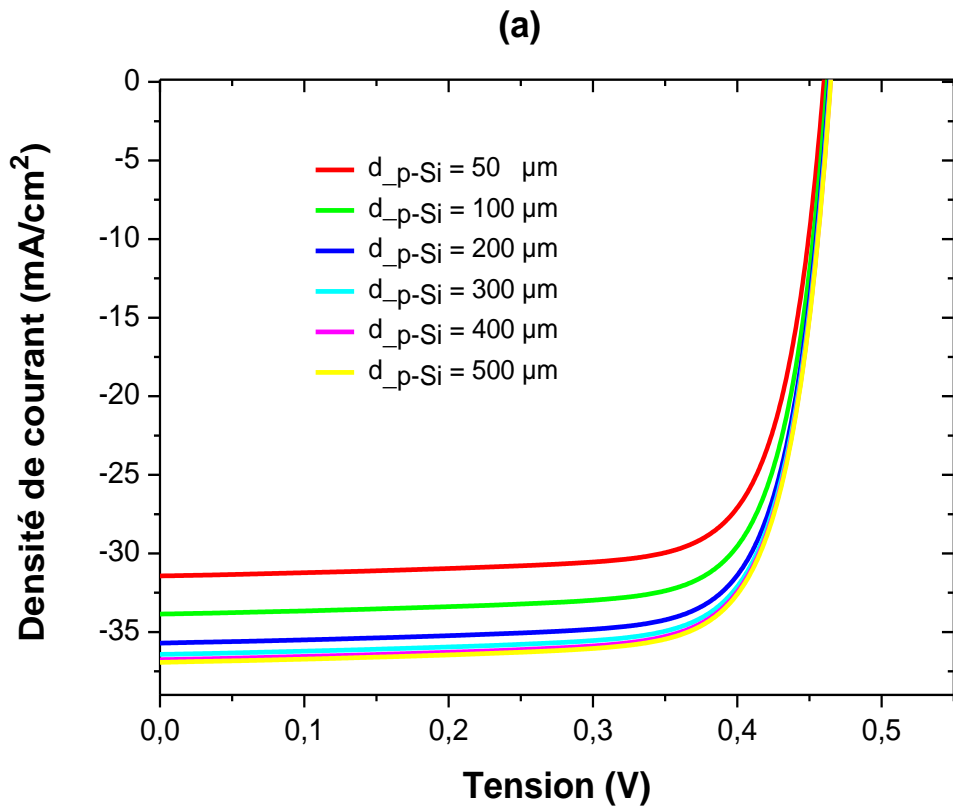


Fig. IV.8 Variation des courbes J(V) et EQE en fonction de l'épaisseur de la cellule supérieure CIGS: (a) variation J-V de l'absorber p-CIGS, (b) variation J-V de la couche de tampon n-Zn (O, S), (c) variation EQE de l'absorber p-CIGS et (d) variation EQE de la couche de tampon n-Zn (O, S).



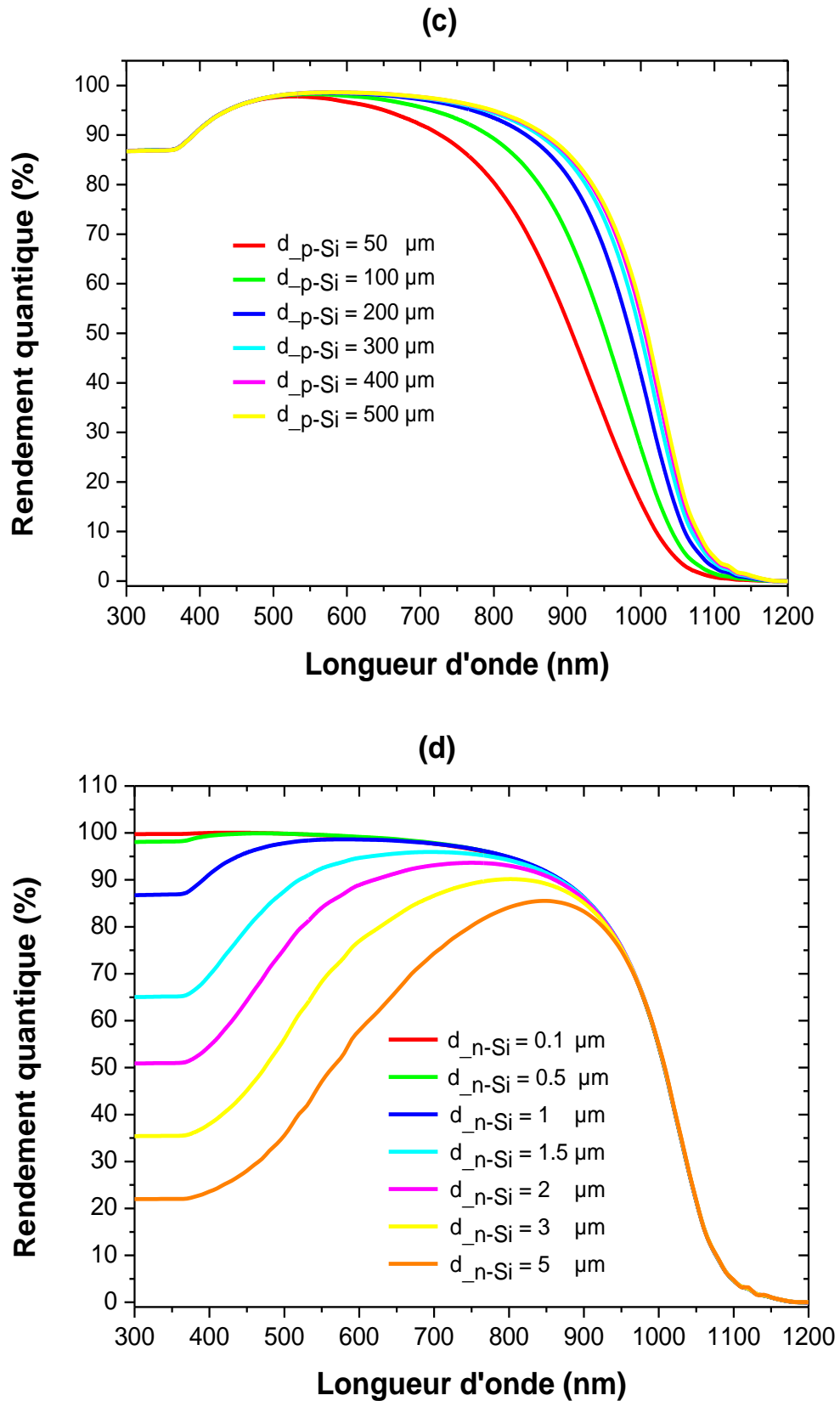


Fig. IV.9 Variation des courbes J(V) et EQE en fonction de l'épaisseur de la cellule inférieure Si : (a) variation J-V de l'absorbeur p-Si, (b) variation J-V de la couche de tampon n-Si, (c) variation EQE de l'absorbeur p-Si et (d) variation EQE de la couche de tampon n-Si.

### IV.3.3 Cellule solaire tandem CIGS/Si

La structure de base de la cellule solaire à double jonctions en CIGS/Si proposée est représentée sur la figure IV.10. Cette conception consiste de deux cellules solaires : une cellule solaire supérieure CIGS à large bande interdite et une cellule inférieure Si à faible bande interdite dont le but d'absorber une large gamme du spectre. Les deux cellules sont similaires dans leur structure  $pn$  (régions de type  $p$ , et de type  $n$ , respectivement du matériau utilisé). Elles sont connectées en série par une jonction tunnel. La cellule est soumise à un éclairage par le spectre solaire AM1.5 de densité de puissance  $100 \text{ mW/cm}^2$ . Les cellules solaires tandem CIGS/Si représentent une approche avancée pour maximiser le rendement de la conversion de l'énergie solaire. En combinant deux types de semi-conducteurs différents CIGS ( $\text{Cu(In,Ga)Se}_2$ ) et silicium cristallin (Si), ces cellules exploitent une plus grande portion du spectre solaire que les cellules traditionnelles à jonction unique, offrant ainsi un rendement plus élevé. Un élément clé de la performance de la cellule supérieure CIGS de la cellule tandem réside dans la couche tampon, située entre l'absorbeur CIGS (de type  $p$ ) et la couche de transport électronique généralement un oxyde transparent de type  $n$  ( $n\text{-ZnO}$ ). Cette couche assure une jonction  $p$ - $n$  de haute qualité, limite les recombinaisons électroniques aux interfaces, et influence significativement la transparence optique de la cellule supérieure, ce qui est crucial dans une configuration tandem. Historiquement, le CdS a été largement utilisé comme couche tampon, mais sa toxicité a poussé la recherche vers des alternatives plus respectueuses de l'environnement, comme le  $\text{Zn(O,S)}$ ,  $\text{ZnS}$ ,  $\text{ZnSTe}$ ,  $\text{CdZnS}$ . C'est dans cette optique que nous avons choisi de réaliser une simulation de cellule tandem intégrant ses différents matériaux comme couches tampons.

Les couches tampons dans une cellule solaire tandem CIGS/Si sont un facteur déterminant pour la performance globale de la cellule. Ainsi, le choix du matériau tampon dépendra de plusieurs critères, notamment la transparence optique, la compatibilité avec les procédés de fabrication (CIGS), la stabilité thermique et chimique, ainsi que la non-toxicité du matériau. La figure (Fig. IV.10) illustre la structure de la cellule solaire tandem CIGS/Si à deux terminaux proposée avec différents couche tampon ( $\text{ZnS}$ ,  $\text{ZnSTe}$ ,  $\text{CdS}$ ,  $\text{ZnSTe}$ ,  $\text{Zn(S,O)}$ ) à simulé.

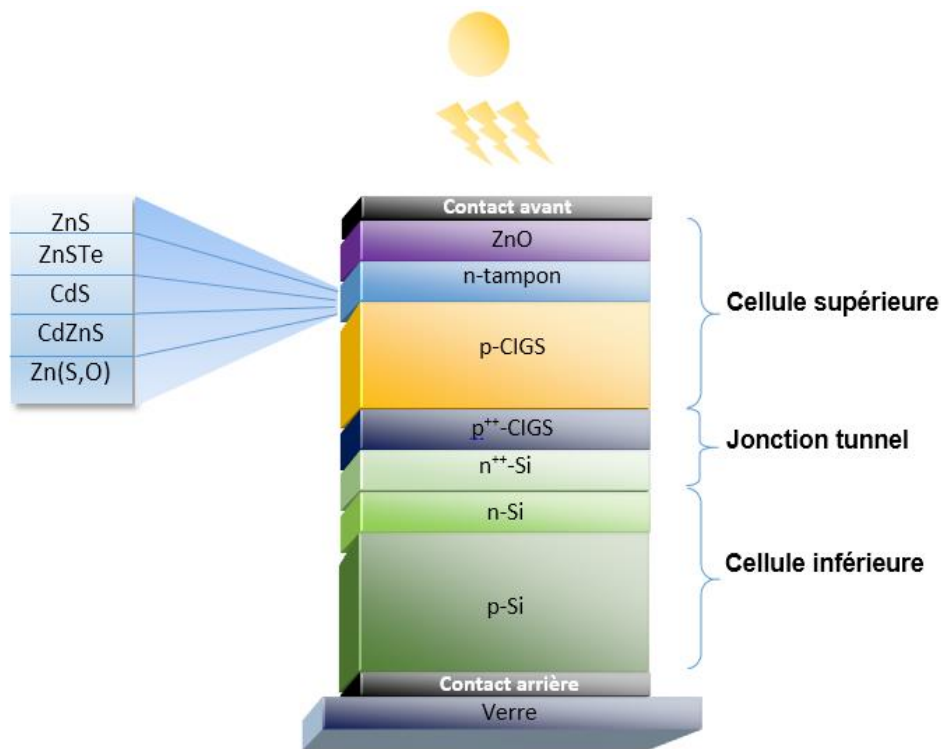


Fig. IV.10 Schéma de la cellule solaire tandem CIGS/Si à deux terminaux proposée avec jonction tunnel et différentes couches tampons (ZnS, ZnSTe, CdS, ZnSTe, Zn(S,O)).

#### IV.3.3.1 L'effet de l'épaisseur de différentes couches tampons de la cellule supérieure

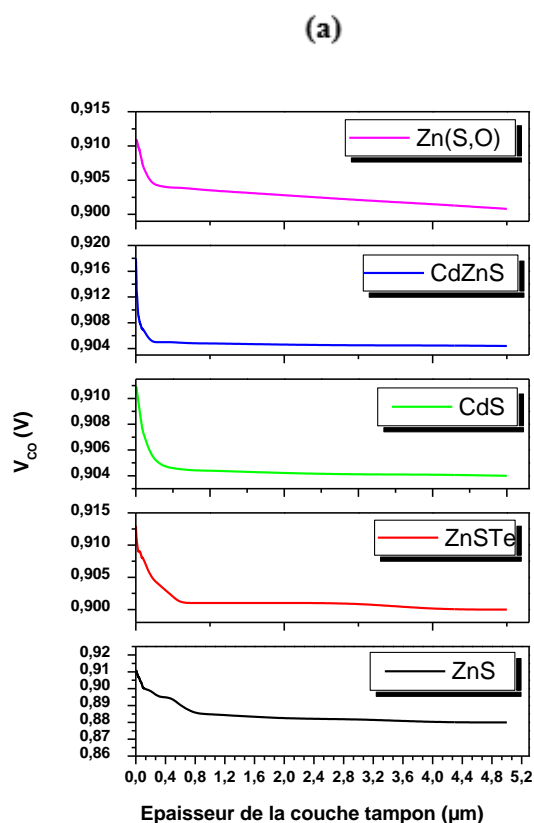
Les couches tampons, bien qu'elles soient minces, ont un effet déterminant sur le rendement et la stabilité des cellules solaires tandem. Leur matériau, leur épaisseur et leurs propriétés électroniques doivent être soigneusement optimisés pour maximiser la collecte de courant, limiter les pertes par recombinaison et assurer un bon couplage entre les deux sous-cellules. Et pour cela on a choisi différents tampons de la cellule supérieure CIGS de tandem à optimiser (ZnS, ZnSTe, CdS, ZnSTe, Zn(S, O)) avec d'épaisseur qui a été variée de  $0.01 \mu\text{m}$  à  $5 \mu\text{m}$ . L'effet de l'épaisseur sur les paramètres électriques est illustré dans la figure (Fig. IV.11) et on conclure que :

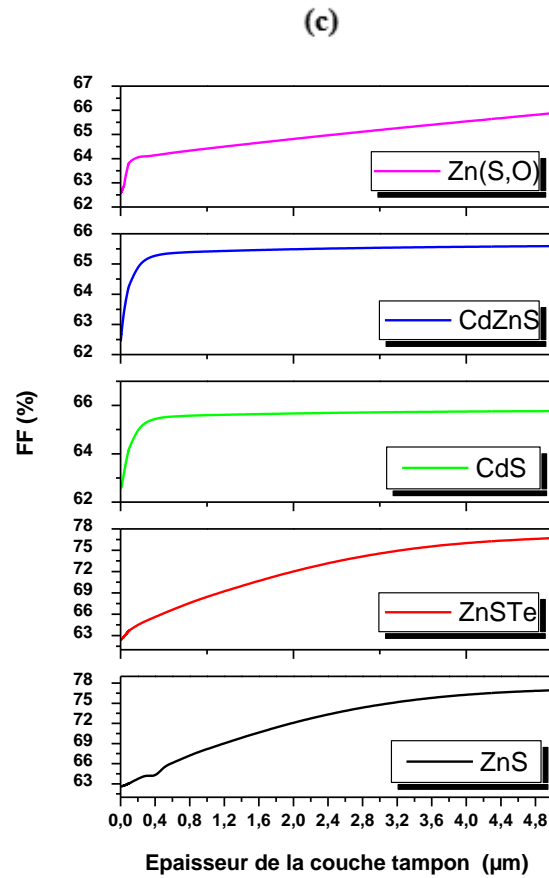
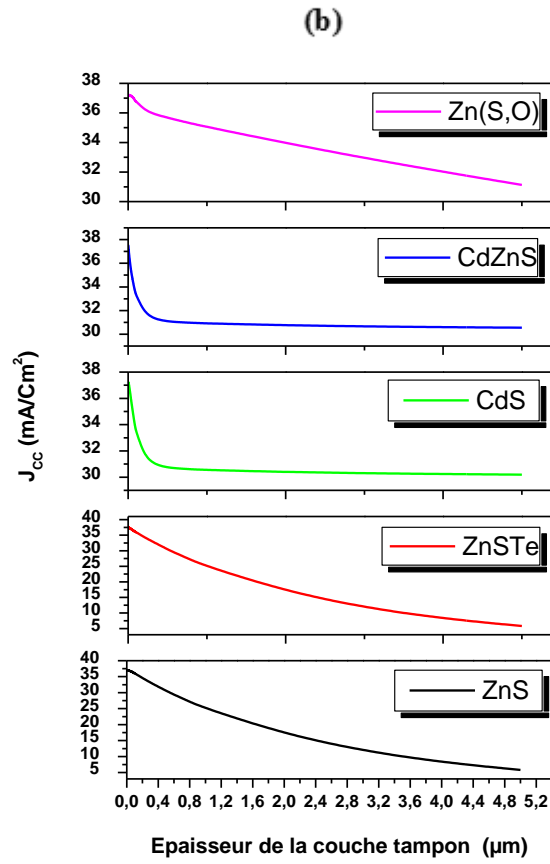
##### ➤ ZnS :

- Le plus faible  $V_{CO}$  global illustrée sur la figure (Fig.IV.11.a). Forte chute et forte sensibilité à l'épaisseur. Cela indique un mauvais alignement de bande et/ou une forte recombinaison interfaciale, rendant ce matériau peu adapté.
- Le plus faible JCC dès le départ comme montrer la figure (Fig.IV.11.b). Montre une très forte sensibilité à l'épaisseur. Suggère un mauvais transport des porteurs ou forte recombinaison à l'interface. Donc il est non optimal pour une cellule tandem.

- FF très élevé comme montrer dans la figure (Fig.IV.11.c). Une forte amélioration observée mais à vérifier par rapport à la transmission (absorbant).
  - Décroissance prononcée de rendement en fonction de l'épaisseur (Fig.IV.11.d). Suggérant une faible transmission et une recombinaison importante.
- **ZnSTe :**
- La figure (Fig.IV.11.a) montre un bon  $V_{CO}$  initial, mais plus grande baisse avec l'épaisseur, suggérant une recombinaison croissante ou mauvais alignement à forte épaisseur.
  - Dans la figure (Fig.IV.11.b) montre que JCC de ZnSTe plus faible que Zn(S,O), avec une décroissance linéaire. Ce matériau a probablement un mauvais alignement de bandes, induisant des pertes par recombinaison.
  - FF très élevé (Fig.IV.11.c). Ce comportement suggère une très bonne passivation mais potentiellement trop absorbant.
  - Une décroissance régulière de rendement par rapport à l'épaisseur (Fig.IV.11.d). Cela peut s'expliquer par un mauvais alignement de bande ou forte absorption.
- **CdS :**
- Forte chute de  $V_{CO}$  au début, mais stabilisation rapide vers 0.9 V comme montrer la (Fig.IV.11.a). C'est un matériau classique avec un bon comportement électrique, mais plus absorbant dans le bleu, ce qui limite la collecte du courant.
  - Même tendance que CdZnS, avec un plateau vers  $\sim 32$  mA/cm<sup>2</sup> de  $J_{CC}$  comme illustrer dans la figure (Fig.IV.11.b). Absorption significative dans les courtes longueurs d'onde ( $\lambda < 520$  nm), ce qui limite le  $J_{CC}$ .
  - FF rapide stabilisation comme illustrer dans la figure(Fig.IV.11.c). Classique, performant mais limite toxique.
  - Une forte sensibilité de rendement par rapport à l'épaisseur (Fig.IV.11.d). Donc il a une forte absorption dans le bleu qui limite les performances à forte épaisseur.
- **CdZnS :**
- $V_{CO}$  légèrement inférieur à Zn(S,O) mais relativement stable après 0.2  $\mu$ m (Fig.IV.11.a). Il a un bon comportement, mais légèrement plus de pertes probablement liées à des recombinaisons plus importantes.
  - $J_{CC}$  de la figure (Fig.IV.11.b) est initialement élevé, mais chute rapide dès que l'épaisseur dépasse 0.2  $\mu$ m. Cela reflète une absorption non négligeable et des pertes de porteurs dans les couches épaisses.

- La figure (Fig.IV.11.c) montre une stabilisation rapide de FF. Un bon FF, mais un peu inférieur à Zn(S,O).
  - Forte décroissance initiale de rendement illustrer dans la figure (Fig.IV.11.d). Montre un bon rendement initial, mais sensible à l'épaisseur.
- **Zn(S,O) :**
- Comporte le  $V_{CO}$  le plus stable et relativement élevé ( $\sim 0.905$  V) illustrée sur la figure (Fig.IV.11.a). Très faible sensibilité à l'épaisseur au-delà de  $0.2 \mu\text{m}$ . Montre un excellent alignement de bandes, faible recombinaison et très bonne transparence optique.
  - Le matériau le plus performant en  $J_{CC}$  jusqu'à  $\sim 0.3 \mu\text{m}$  montrer dans la figure (Fig.IV.11.b) . La baisse est progressive mais modérée. Bonne transparence optique et faible recombinaison. Donc un bon choix pour le tandem.
  - FF augmente régulièrement comme montrer la figure (Fig.IV.11.c). Cela indique que ce matériau à un bon compromis transparence, conduction et une meilleure passivation.
  - Une faible décroissance de rendement. Très bon alignement de bande, et une absorption faible. Donc un matériau performant.





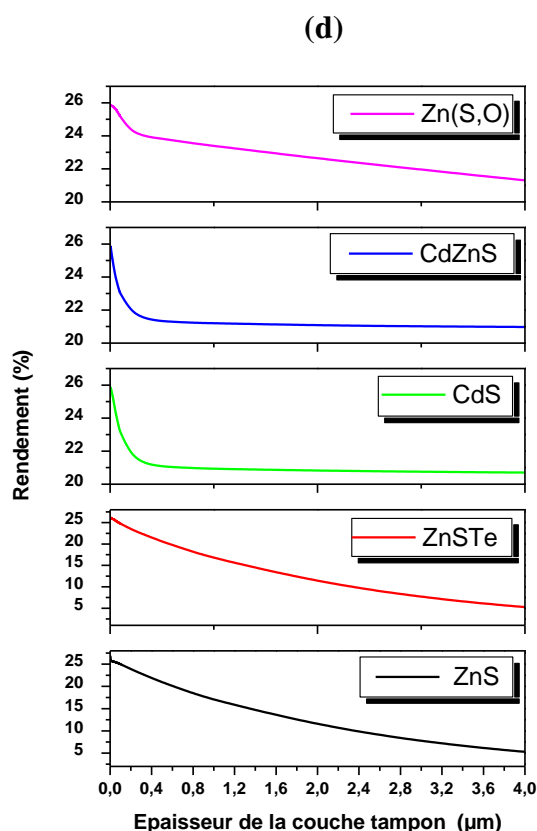


Fig. IV.11 Les paramètres électriques de la cellule tandem en fonction de l'épaisseur avec différents tampons : (a)  $V_{CO}$ , (b)  $J_{CC}$ , (c) FF, (d)  $\eta$ .

Par conséquent :

**Zn(S,O)** est le matériau le plus robuste et reste le meilleur compromis face aux variations d'épaisseur : il conserve un  $V_{CO}$  élevé et stable, il offre un bon  $J_{CC}$  élevé, une transparence élevée et un alignement favorable des bandes. Il offre un bon équilibre entre FF, transparence et compatibilité électrique, ce qui le rend très adapté aux structures tandem CIGS/Si. Il offre aussi un rendement élevé et moins de perte avec l'épaisseur, grâce à :

- Un large gap optique,
- Un bon alignement de bandes avec CIGS,
- Une faible recombinaison interfaciale.

#### IV.3.3.2. L'effet de dopage de différentes couches tampons de la cellule supérieure

Le dopage consiste à introduire des impuretés dans le matériau pour en modifier la concentration en porteurs de charge (électrons pour un dopage n, trous pour un dopage p). Dans le cas des couches tampons de type n comme notre sélection de matériaux (n-ZnS, n-ZnSTe, n-CdS, n-ZnSTe, n-Zn(S,O)) de la cellule supérieure de tandem, le dopage permet de contrôler la résistivité électrique de la couche, ajuster le champ électrique à la jonction p-n,

améliorer la sélectivité du transport des électrons, et réduire les recombinaisons interfaciales si le dopage est bien adapté. Pour conclure, le dopage des couches tampons dans la cellule supérieure influence fortement la qualité de la jonction, le transport des charges et les performances globales du dispositif. Il est donc essentiel de trouver un compromis optimal entre conductivité, transparence optique, et passivation pour maximiser le rendement d'une cellule solaire tandem. L'effet de dopage sur les paramètres électriques est illustré dans la figure (Fig. IV.12), on conclure que :

➤ **ZnS**

- Dans la figure (Fig. IV.12.a) Très peu de variation, et le  $V_{CO}$  reste le plus bas parmi tous les matériaux testés. Cela reflète un mauvais alignement des bandes et/ou une forte recombinaison interfaciale, rendant ZnS moins adapté dans cette configuration tandem.
- Comportement décroissant du  $J_{CC}$  avec l'augmentation du dopage dans la figure (Fig. IV.12.b). Cela peut être dû à une augmentation de l'absorption optique dans la couche tampon ou une augmentation des recombinaisons à l'interface. Ce matériau semble mal adapté à des densités de dopage élevées.
- FF (Fig. IV.12.c) reste quasiment plat et légèrement inférieur aux autres matériaux (~62.2–62.4 %). Cela suggère une moins bonne qualité de contact électrique ou une recombinaison interfaciale persistante, même à forte densité de dopage.
- Rendement en baisse continue avec l'augmentation de Nd (Fig. IV.12.d). Cela peut s'expliquer par une augmentation des recombinaisons, un alignement de bandes défavorable, ou une absorption excessive de photons par la couche tampon. ZnS semble le moins adapté pour une cellule tandem performante.

➤ **ZnSTe**

- La courbe (Fig. IV.12.a) est globalement plate, avec une faible augmentation du  $V_{CO}$ . Cela traduit une faible sensibilité au dopage, probablement à cause d'un mauvais alignement de bande ou d'une densité élevée de défauts à l'interface.
- $J_{CC}$  de la courbe (Fig. IV.12.b) reste très stable autour de 42.5 mA/cm<sup>2</sup>, ce qui pourrait indiquer un bon comportement optique, mais ne signifie pas nécessairement un rendement élevée si  $V_{CO}$  est faible. Nécessite une analyse conjointe avec le  $V_{CO}$  pour en juger la pertinence.
- FF reste stable autour de 62.5 % mais avec une tendance très légèrement décroissante comme montrer la figure (Fig. IV.12.c). Cela montre un comportement moyen du point de vue des recombinaisons ou de la résistance série.

- Rendement assez constant autour de 25.6 %, avec une très légère baisse à forte densité de dopage (Fig. IV.12.d). Cela peut refléter un bon comportement optoélectronique, mais aussi une sensibilité plus faible au dopage. À noter : les performances sont bonnes mais moins stables que celles du Zn(S,O).

➤ **CdS**

- La courbe (Fig. IV.12.a) montre une légère baisse du  $V_{CO}$  avec l'augmentation de la densité de donneurs. Cela peut s'expliquer par une augmentation des recombinaisons aux interfaces, ou une barrière de conduction mal alignée à cause du dopage excessif.
- $J_{CC}$  augmente clairement avec la densité de dopage jusqu'à un plateau ( $\sim 42$  mA/cm<sup>2</sup>) comme montrée (Fig. IV.12.b). Cela peut s'expliquer par une réduction de la recombinaison interfaciale au fur et à mesure que le champ de déplétion devient plus fort à haute densité de donneurs. CdS reste performant malgré sa bande interdite plus faible ( $\sim 2.4$  eV), mais son absorption des photons bleus reste une limite.
- FF augmente nettement à partir de  $N_d \approx 10^{18}$  cm<sup>-3</sup> jusqu'à atteindre  $\sim 63.5$  % comme illustrée sur la figure (Fig. IV.12.c). Cette amélioration est due à une réduction de la recombinaison interfaciale grâce à un champ électrique plus fort dans la zone de déplétion. Cela reflète une meilleure qualité de jonction à haut dopage, mais nécessite une optimisation fine du dopage.
- Le rendement augmente brusquement autour de  $10^{18}$  cm<sup>-3</sup>, puis atteint un plateau à  $\sim 25.2$  % (Fig. IV.12.d). Cela traduit un meilleur alignement des bandes et une réduction des recombinaisons interfaciales à des niveaux de dopage optimaux. Cependant, le rendement reste très faible à faible dopage, ce qui souligne la sensibilité du CdS à la densité de dopage pour assurer une bonne performance.

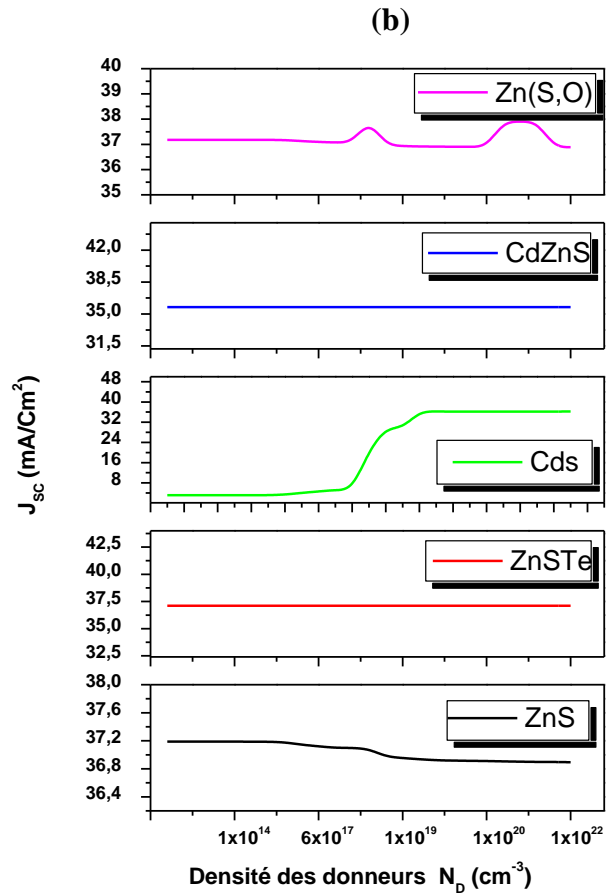
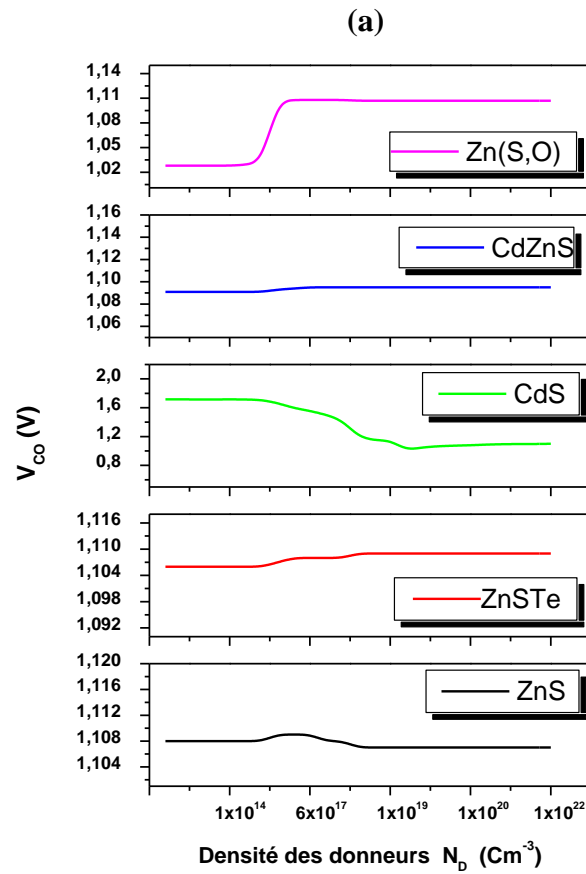
➤ **CdZnS**

- Comportement proche de Zn(S,O) mais avec une valeur de  $V_{CO}$  légèrement plus faible comme illustrée sur la figure (Fig. IV.12.a). Cela montre que c'est une alternative viable, mais peut-être avec un alignement des bandes un peu moins optimal.
- $J_{CC}$  illustrée sur la figure (Fig. IV.12.b) est aussi très constant ( $\sim 39$  mA/cm<sup>2</sup>), avec très peu de dépendance vis-à-vis du dopage. Cela montre également une bonne transparence optique, bien que légèrement moins performante que CdS en génération de courant.

- Léger déclin du FF (Fig. IV.12.c) avec l'augmentation de  $N_d$ , ce qui peut être attribué à une augmentation de la recombinaison ou mauvais alignement des bandes à haut dopage. Performances acceptables mais pas optimales.
- Le rendement est relativement constant ( $\sim 24.6\%$ ) sur toute la plage de dopage (Fig. IV.12.d). Cela montre une bonne stabilité mais pas d'amélioration significative même à haute densité de dopage. Cela pourrait indiquer une limitation intrinsèque liée soit au matériau, soit à l'interface avec CIGS.

➤ **Zn(S,O)**

- La courbe (Fig. IV.12.a) montre une forte augmentation du  $V_{CO}$  pour une certaine plage de dopage ( $\sim 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ), puis elle se stabilise. Cela indique que le Zn(S,O) bénéficie d'un bon alignement des bandes et d'un meilleur champ de déplétion, ce qui réduit la recombinaison des porteurs et améliore le  $V_{CO}$ . Donc, c'est le meilleur résultat parmi tous les matériaux analysés, ce qui justifie son choix comme candidat performant.
- Le courant de court-circuit  $J_{CC}$  (Fig. IV.12.b) reste relativement stable autour de 37–38 mA/cm<sup>2</sup> pour toutes les densités de dopage. Cela indique une bonne transparence optique et une faible absorption parasite, même à haute densité de dopage. Ce comportement suggère un alignement de bandes favorable et une recombinaison minimale des porteurs photogénérés.
- Le FF (Fig. IV.12.c) est quasiment constant ( $\sim 62.7\%$ ), peu affecté par la densité de donneurs. Ce comportement stable montre que Zn(S,O) offre un bon alignement de bandes, une faible recombinaison, et une résistance série bien contrôlée quelle que soit la densité. Ce matériau montre encore une fois une grande robustesse électronique.
- Très bonne stabilité du rendement ( $\sim 25.4\%$ ) sur toute la plage de dopage comme montrer la figure (Fig. IV.12.d). Cela suggère une excellente compatibilité énergétique avec l'absorbeur CIGS, ainsi qu'une faible recombinaison interfaciale, indépendamment du dopage. C'est un indicateur fort que le Zn(S,O) est un excellent candidat tampon dans les cellules tandem.



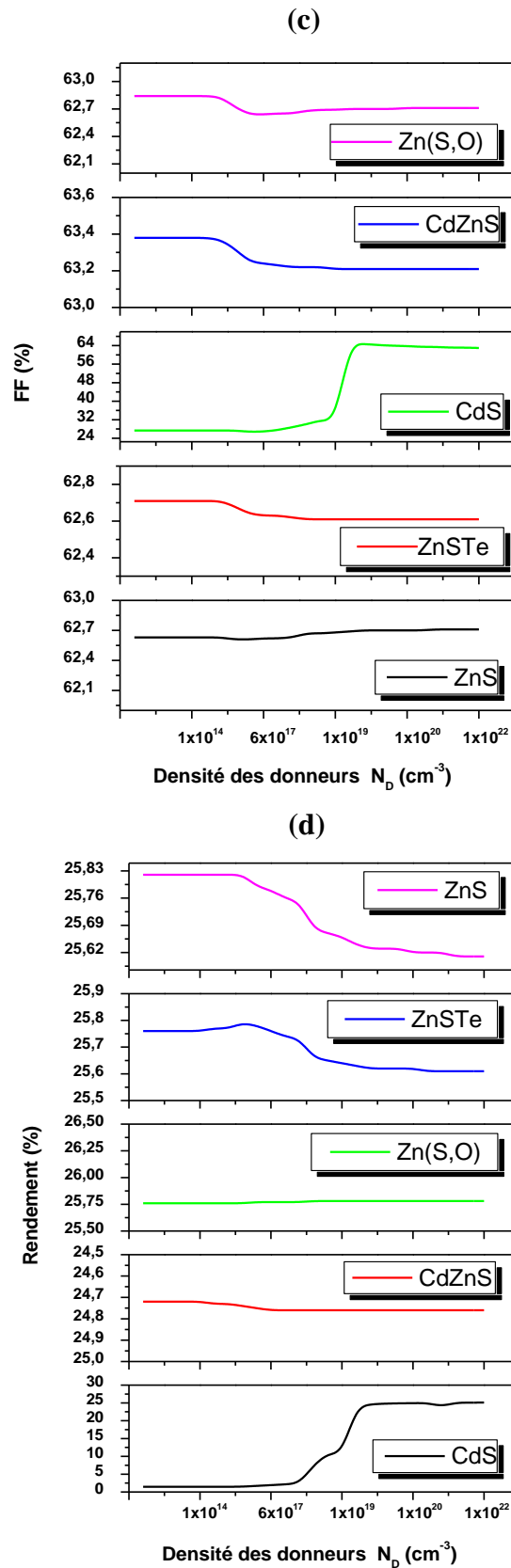


Fig. IV.12 Les paramètres électriques de la cellule tandem en fonction de dopage avec différents tampons : (a)  $V_{CO}$ , (b)  $J_{CC}$ , (c) FF, (d) rendement.

Par conséquent :

- **Zn(S,O)** se distingue par sa stabilité face aux variations de dopage (peu sensible au dopage). Un meilleur comportement, avec une forte augmentation du  $V_{CO}$  à une densité optimale, ce qui indique un excellent couplage optoélectronique avec l'absorbeur CIGS. Assurent de bons niveaux de  $J_{CC}$ . Compatibilité environnementale. Bon FF et son rendement élevé, ce qui en fait un choix très favorable pour le tandem.

#### IV.3.3.3 Effet des différents couche tampon sur les caractéristiques J-V de la cellule tandem CIGS/Si

La figure IV.13 montre les caractéristiques simulées J-V, avec les conditions d'illumination AM1.5 ( $100 \text{ mW/cm}^2$ ), pour différentes couches tampons. Le tableau IV.2 inclut tous les paramètres photovoltaïques ( $J_{CC}$ ,  $V_{CO}$ , FF et  $\eta$ ) de la cellule solaire tandem CIGS / Si avec différentes couches tampons (ZnSTe, CdS, CdZnS, ZnS, Zn(O,S)). D'après ces courbes, on peut remarquer que les cellules solaires avec Zn(O,S) comme couche tampon donnent un haut rendement de conversion. Quant à la cellule solaire avec une couche tampon de ZnSTe, elle avait le plus faible rendement de conversion.

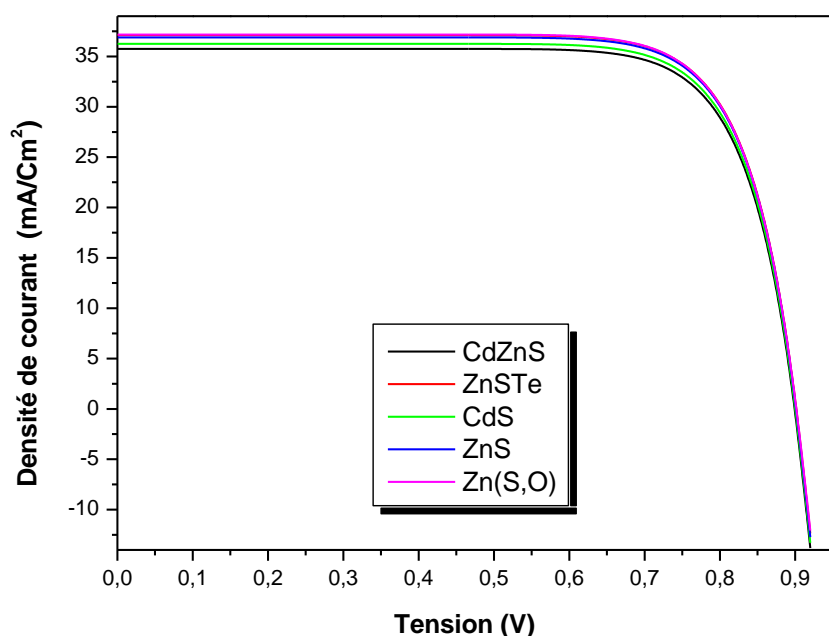


Fig IV.13 Caractéristiques J(V) pour la cellule solaire tandem CIGS/Si avec différents couches tampons.

Tableau IV.2 Paramètres  $V_{CO}$ ,  $J_{CC}$ , FF et  $\eta$  pour la cellule tandem CIGS/Si pour différents tampons.

Couche tampon	$V_{CO}$ (V)	$J_{CC}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	FF(%)	$\eta$ (%)
CdS	0.90	36.68	62.82	25.45
ZnS	0.90	36.95	62.67	25.65
Zn(O,S)	0.90	36.99	76.93	25.68
ZnSTe	0.90	36.27	62.99	25.14
CdZnS	0.90	36.89	62.70	25.61

#### IV.3.3.4 Effet des différents couche tampon sur les caractéristiques P-V de la cellule tandem CIGS/Si

La puissance (P) générée par la cellule en fonction de la tension appliquée (V) pour différentes cellules tampons (CdZnS, ZnSTe, CdS, ZnS, Zn(S,O)) dans une cellule solaire tandem est montrée dans la figure (Fig IV.14). La puissance est le produit du courant et de la tension ( $P = I \times V$ ).

La courbe P-V est typiquement parabolique. Ce dernier est constitué en trois zones de fonctionnement, Une zone de montée initiale quasi linéaire (augmentation de la puissance avec la tension) jusqu'à atteindre un maximum appelé le point de puissance maximale (MPP) qui est également une zone optimale considérée comme un critère important pour déterminer le rendement de conversion de la lumière en électricité. Puis, une zone de diminution de puissance (Chute brutale) lorsque la tension approche la tension en circuit ouvert ( $V_{CO}$ ), car le courant devient très faible à haute tension.

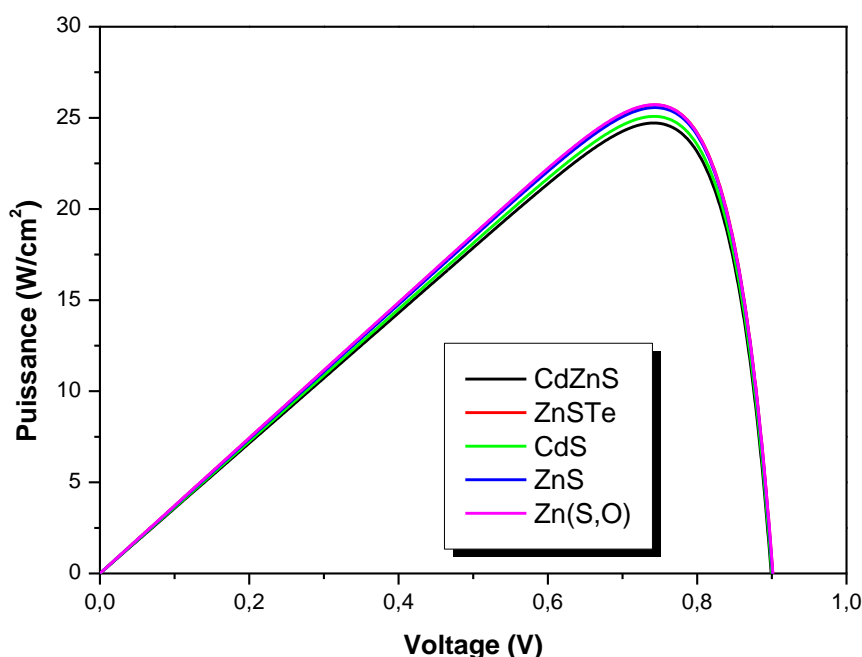


Fig IV.14 L'évolution de la puissance de sortie (W) en fonction de voltage (V) pour différentes couches tampons (CdZnS, ZnSTe, CdS, ZnS, Zn(S,O)) dans une cellule solaire tandem.

Les courbes sont très proches les unes des autres ce qui montre que tous ces matériaux (CdZnS, ZnSTe, CdS, ZnS, Zn(S,O)) assurent une interface de qualité comparable. La recombinaison aux interfaces est bien contrôlée pour chacun. La transparence optique et la compatibilité énergétique sont également proches. Cela indique que chacun de ces tampons est potentiellement compatible avec la structure tandem proposée.

#### IV.3.4 Cellule solaire tandem CIGS/ Si intégrant une couche tampon Zn(S,O)

Dans la cellule CIGS (cellule supérieure), une couche tampon est nécessaire pour former une jonction p-n de qualité entre l'absorbeur p-type CIGS et la couche de fenêtre n-type (généralement ZnO). Traditionnellement, le CdS est utilisé comme tampon, mais il présente plusieurs inconvénients, il contient du cadmium, un élément toxique, et sa bande interdite (~2.4 eV) est insuffisamment large, ce qui entraîne une perte de photons (surtout dans le bleu du spectre). Suite à nos simulations comparant différents matériaux pour la couche tampon, et compte tenu des performances supérieures du Zn(S,O) par rapport aux autres options, ce dernier a été identifié comme le tampon le plus performant. Le Zn(S,O), un matériau à base de zinc, de soufre et d'oxygène, est une alternative sans cadmium très attractive. Il possède une bande interdite plus large (ajustable de ~2.8 à 3.6 eV selon le ratio S/O), ce qui réduit les pertes optiques, il permet une meilleure transparence dans la région UV/bleu, augmentant

le courant de court-circuit ( $J_{CC}$ ), et il offre une meilleure flexibilité dans l'alignement des bandes, notamment lorsque l'absorbeur CIGS est riche en gallium (Ga), ce qui améliore le transport des charges. L'intégration du Zn(S,O) comme tampon dans la cellule supérieure CIGS influence directement les performances de la structure tandem. Améliore le courant généré dans la cellule supérieure, ce qui est essentiel dans les tandems 2T où le courant est limité par la sous-cellule la moins performante, réduire les recombinaisons aux interfaces, grâce à une meilleure passivation, et améliore aussi le rendement global en raison de la meilleure transparence et de la stabilité à long terme du Zn(S,O). Les résultats expérimentaux des rendements de conversion des cellules solaires considérées, fabriquées par diverses techniques de dépôt, sont donnés dans le Tableau IV.3. D'après la littérature [23-26], nous confirmons que les résultats révélés des cellules solaires à base de p-CIGS/n-Zn(O,S) et p-Si/n-Si fonctionnent avec succès à un rendement améliorée.

Tableau IV.3 Résultats expérimentaux des rendements des cellules solaires CIGS et Si.

Couche absorbante/couche tampon	Méthode d'élaboration	Rendement (%)	Références
p-CIGS /n-Zn(O,S)	Déposition par bain chimique	6.4	[23]
	Co-Sputtering	9.05	[24]
	Pulvérisation	13.0	[25]
p-Si/n-Si	Recyclage par méthodes thermiques et chimiques	13.0-15.0	[26]

La Fig. IV.15 montre les caractéristiques J(V) de la CIGS (cellule supérieure), du c-Si (cellule inférieure) et de la cellule tandem CIGS/Si.

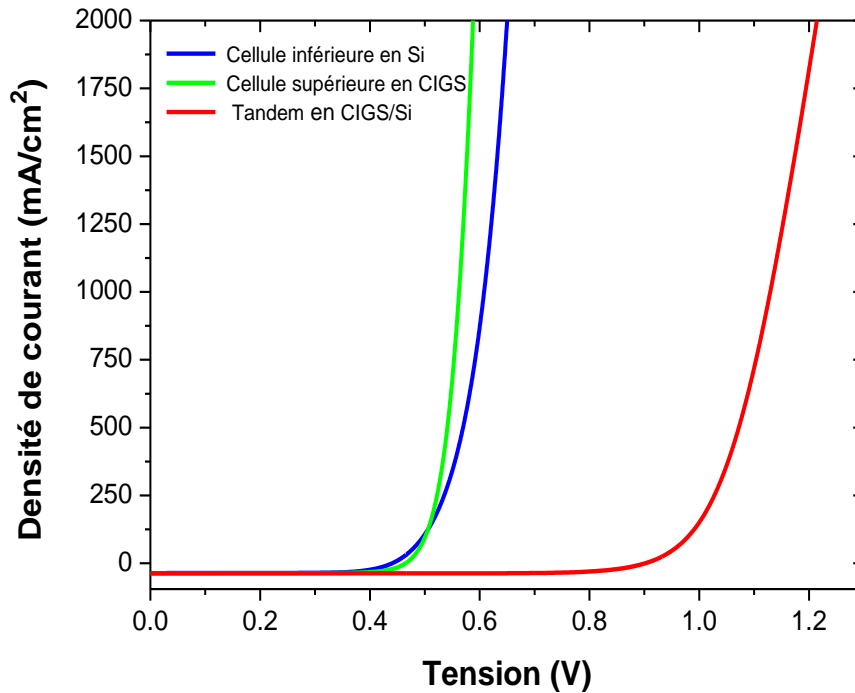


Fig IV.15 Caractéristiques J(V) pour la cellule inférieure Si, la cellule supérieure CIGS et la cellule solaire tandem CIGS/Si.

Une cellule solaire tandem à deux bornes fonctionne électriquement exactement de la même manière que deux diodes connectées en série. La densité de courant de court-circuit de la cellule tandem, soit  $36.99 \text{ mA/cm}^2$ , est proche de celle de la cellule inférieure (Si) et de la cellule supérieure (CIGS), soit  $36.85 \text{ mA/cm}^2$  et  $36.01 \text{ mA/cm}^2$ , respectivement. La tension en circuit ouvert de la conception tandem, soit  $0.90 \text{ V}$ , est exactement égale à la somme de la tension en circuit ouvert des cellules Si et CIGS, soit  $0.46 \text{ V}$  et  $0.44 \text{ V}$ , respectivement. À partir de ces observations, on peut conclure que le fonctionnement de la cellule tandem est de la même manière que celui des cellules Si et CIGS connectées en série. Cependant, le FF de la cellule tandem, soit  $76.93 \%$ , est légèrement supérieur à celui des cellules à jonction unique Si et CIGS, soit  $76.54 \%$  et  $73.15 \%$ , respectivement. L'amélioration du  $V_{CO}$  et du FF a permis d'améliorer le rendement de conversion dans le cas des cellules tandem, c'est-à-dire  $25.68 \%$ , ce qui est nettement supérieur aux rendements de conversion des cellules solaires à jonction simple Si et CIGS, c'est-à-dire  $13.16 \%$  et  $11.63 \%$ , respectivement. Le tableau IV.4 résume les résultats simulés de différents paramètres de cellules solaires tandem en silicium (Si), chalcopyrite (CIGS) et le tandem CIGS/Si.

Tableau IV.4 Résumé des résultats de performance des cellules solaires simples Si, CIGS et tandem CIGS/Si.

Paramètres	V <sub>CO</sub> (V)	J <sub>CC</sub> (mA/cm <sup>2</sup> )	FF(%)	η(%)
Cellule inférieure en Si	0.46	36.85	76.54	13.16
Cellule supérieure en CIGS	0.44	36.01	73.15	11.63
Cellule tandem CIGS/Si	0.90	36.99	76.93	25.68

#### IV.3.4.1 Influence de la température sur les paramètres de la cellule tandem CIGS/Si

Étant donné que le fonctionnement global de la cellule peut être affecté par la température, l'effet de la température sur divers paramètres de la cellule tandem proposée est illustré à la Fig. IV.16. L'effet de la température sur des paramètres tels que V<sub>CO</sub>, J<sub>CC</sub>, η et FF a été étudié.

La réduction significative de V<sub>CO</sub> en fonction de la température est due à une densité de courant de saturation inverse accrue car il existe une dépendance exponentielle de la concentration intrinsèque de porteurs sur la température comme le montre la relation [5] :

$$n_{i1,2}^2 = N_{c1,2} N_{v1,2} \exp\left(-\frac{E_{g1,2}}{kT}\right) \quad (\text{IV.7})$$

Où k est la constante de Boltzmann, N<sub>c</sub> et N<sub>v</sub> sont les densités d'états effectives pour les sous-cellules données comme suit :

$$N_{c,v} (cm^{-3}) = 2,5 \cdot 10^{19} \left(\frac{m_{n,p}^*}{m_0}\right)^{1.5} \left(\frac{T}{300}\right)^{1.5} \quad (\text{IV.8})$$

$m_{n,p}^*$  sont les masses effectives des porteurs.

La bande interdite est inversement proportionnelle à la température comme suit [22] :

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (\text{IV.9})$$

Où E<sub>g</sub>(T) est la bande interdite du matériau à une température particulière T, et α et β sont les constantes.

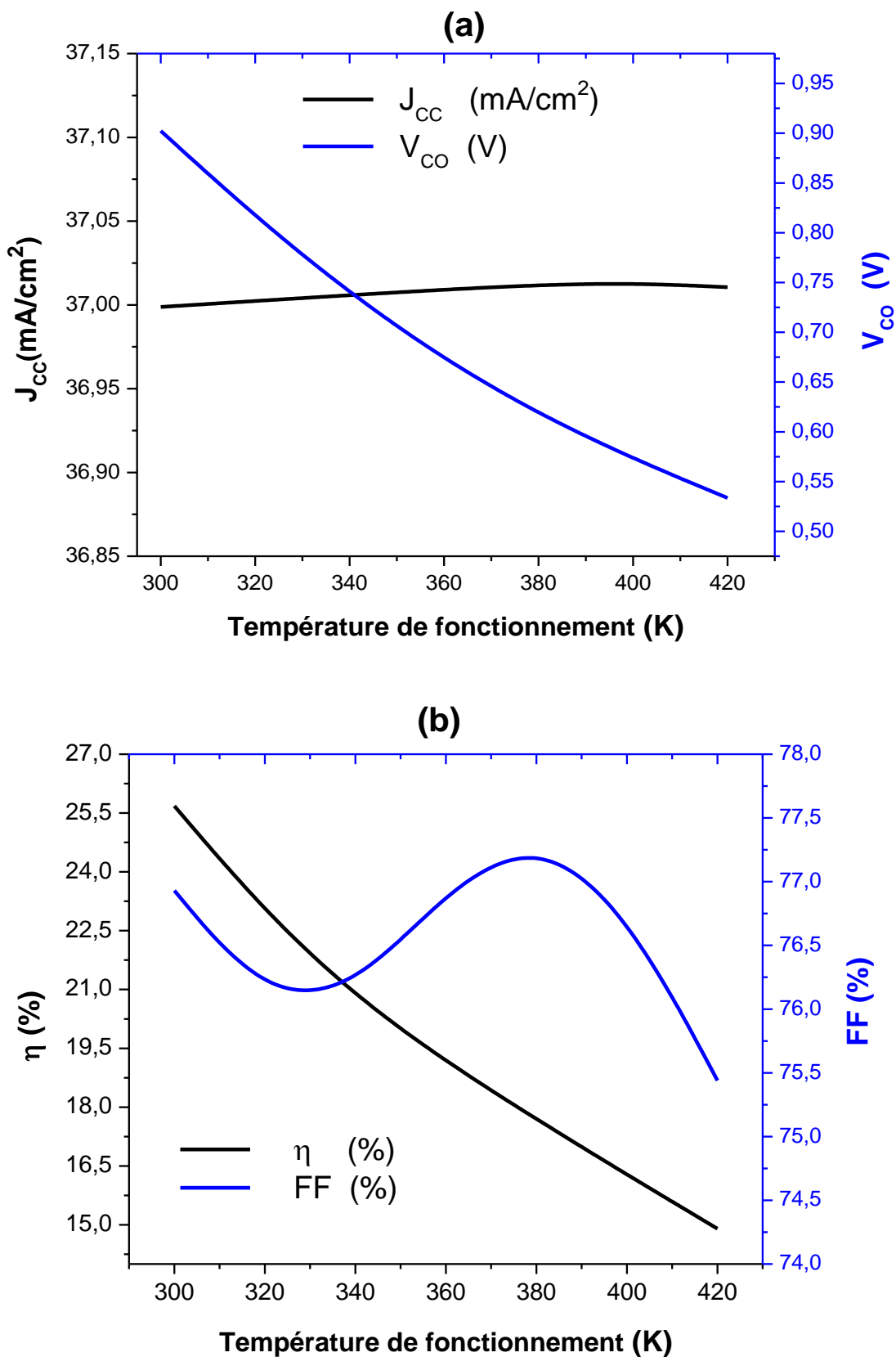


Fig. IV.16 (a) Variations du  $J_{cc}$  et de  $V_{co}$  (b) du FF et du  $\eta$  en fonction de la température.

La figure (Fig.IV.17) montre la courbe  $J(V)$  pour une cellule solaire tandem à une plage de températures de 300 à 500 K. En conclusion, on peut judicieusement supposer qu'avec l'augmentation de la température du dispositif, le rendement de la cellule peut être compromise.

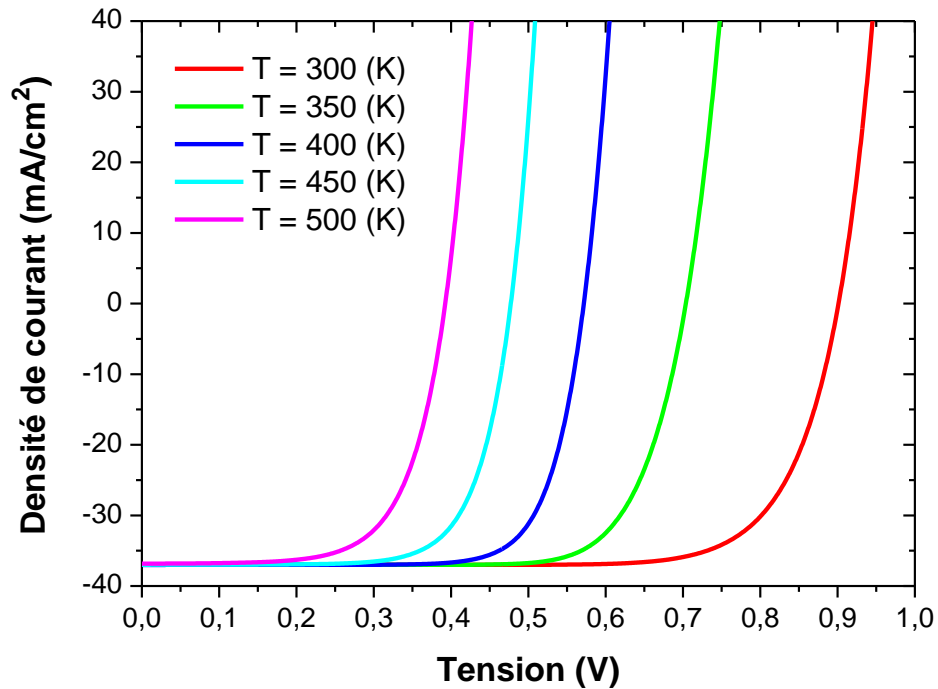


Fig. IV.17 Effet de la température de fonctionnement sur les caractéristiques  $J(V)$  de la cellule solaire tandem.

Nos résultats pour les trois structures proposées de cellules solaires à base de cellules tandem CIGS, c-Si et CIGS/Si sont donnés dans le tableau IV.4 et le rendement optimisé comparée aux données publiées [27. 4-8. 22. 28-33] pour les cellules solaires à double jonction est résumée dans le tableau IV.5.

Le tableau (IV.4) présente les performances de différentes cellules solaires, à savoir la cellule inférieure en silicium (Si), la cellule supérieure en CIGS (Copper Indium Gallium Selenide), ainsi que la cellule tandem CIGS/Si. On peut observer les paramètres suivants pour chaque type de cellule : la tension en circuit ouvert ( $V_{CO}$ ), la densité de courant de court-circuit ( $J_{CC}$ ), le facteur de forme (FF) et le rendement global ( $\eta$ ).

**Cellule inférieure en Si :** La cellule en silicium a une tension de circuit ouvert ( $V_{CO}$ ) de 0,46 V, une densité de courant de 36,85 mA/cm<sup>2</sup>, un facteur de forme de 76,54 % et un rendement de 13,16 %. Cela montre une performance assez stable, mais qui est inférieure comparée à la cellule tandem.

**Cellule supérieure en CIGS** : La cellule en CIGS a une tension de 0.44 V et une densité de courant légèrement inférieure ( $36.01 \text{ mA/cm}^2$ ). Son facteur de forme est de 73.15 % et son rendement de 11.63 %. Bien que cette cellule ait un bon rendement, il est légèrement inférieur à celui de la cellule en silicium.

**Cellule tandem CIGS/Si** : Cette cellule montre une amélioration significative en termes de rendement avec une valeur de 25.68 %. Elle combine les avantages des deux matériaux (CIGS et Si), ce qui permet d'obtenir une tension plus élevée de 0.90 V, une densité de courant similaire ( $36.99 \text{ mA/cm}^2$ ) et un facteur de forme de 76.93 %. Cela en fait la cellule la plus efficace parmi celles comparées.

Tableau IV.5 Comparaison entre les structures proposées avec d'autres références.

Structure	Rendement (%)	Références
CIGS/Si	<b>25.68</b>	<b>Présent travail</b>
	26.7	[27]
CIGS/CIS	19.8	[4]
InGa <sub>N</sub> /Si	38.3	[5]
CZTS/Si	22.9	[6]
Cu <sub>2</sub> O/Si	31.23	[8]
GaInP/Si	31.11	[28]
CdTe/Si	28.45	[29]
	26.71	[30]
Perovskite/Si	28.71	[31]
	24.4	[22]
	33.67	[33]
Perovskite/perovskite	24.86	[32]

Le tableau IV.5 présente les rendements des cellules solaires basées sur différentes structures, ainsi que les références correspondantes. Ces données montrent la performance des cellules tandem ou des cellules composées de matériaux divers.

**CIGS/Si** : Le rendement de la cellule tandem CIGS/Si varie entre 25.68 % (selon le travail actuel) et 26.7 % (référence [27]). Ce rendement est assez compétitif par rapport à d'autres structures.

**CIGS/CIS** : Cette cellule présente un rendement de 19.8 % (référence [4]), ce qui est inférieur à celui des structures CIGS/Si.

**InGa<sub>N</sub>/Si** : Cette cellule présente un rendement très élevé de 38.3 % (référence [5]), ce qui la place parmi les meilleures performances parmi les cellules listées.

**CZTS/Si** : Le rendement de cette cellule est de 22.9 % (référence [6]), ce qui montre une bonne performance mais reste inférieur à celle de l'InGaN/Si et CIGS/Si.

**Cu<sub>2</sub>O/Si** : Le rendement de cette cellule est de 31.23 % (référence [7]), qui est très compétitif, mais toujours en dessous de l'InGaN/Si.

**GaInP/Si** : Le rendement est de 31.11 % (référence [28]), indiquant que cette cellule tandem est également très efficace.

**CdTe/Si** : Cette cellule présente des rendements variant entre 28.45 % et 26.71 % (références [29] et [30]), ce qui la place en compétition directe avec d'autres technologies de cellules solaires de type Si.

**Perovskite/Si** : Le rendement des cellules Perovskite/Si varie entre 24.4 % et 33.67 % (références [22], [31], et [33]). Les cellules Perovskite semblent offrir des rendements intéressants et compétitifs dans la technologie tandem.

**Perovskite/Perovskite** : Cette cellule présente un rendement de 24.86 % (référence [32]), ce qui est relativement faible comparé à d'autres structures tandem, mais reste compétitif dans le domaine des cellules Perovskite.

Les cellules tandem CIGS/Si montrent un rendement très intéressant (25.68 %), mais d'autres structures comme **InGaN/Si** (38.3 %) et **GaInP/Si** (31.11 %) ont des rendements supérieurs. Les cellules **Perovskite/Si** sont également prometteuses, avec un rendement qui atteint jusqu'à 33.67 %.

#### IV.4 Conclusion

Ce travail présente un cadre théorique pour la conception de cellules tandem CIGS/Si à deux terminaux, intégrant une jonction tunnel [ $p^{++}$ -CIGS/ $n^{++}$ -Si]. À l'aide de simulations optimisées réalisées avec l'outil SCAPS-1D, des paramètres clés ont été identifiés pour maximiser le rendement des cellules solaires tandem. Les résultats montrent que la structure proposée peut atteindre un rendement remarquable de **25.68 %**, avec une tension en circuit ouvert ( $V_{CO}$ ) de **0.90 V**, une densité de courant de court-circuit ( $J_{CC}$ ) de **36.99 mA/cm<sup>2</sup>** et un facteur de forme (**FF**) de **76.93 %**. L'épaisseur totale de la cellule tandem a été optimisée à **453 μm**, avec des épaisseurs d'absorbeur idéales de **2 μm** pour la couche CIGS et de **450 μm** pour le silicium. Les bandes interdites optimales des matériaux ont été ajustées à **1.69 eV** pour le CIGS et **1.12 eV** pour le Si, offrant une combinaison idéale pour l'absorption et la conversion efficaces de l'énergie solaire. Nous avons étudié en détail le comportement et la performance d'une cellule solaire tandem CIGS/Si intégrant différentes couches tampons : **CdS, CdZnS, ZnS, ZnSTe et Zn(S,O)**. L'objectif principal était d'évaluer l'influence de

la nature du tampon sur les paramètres photovoltaïques clés, à savoir le courant de court-circuit ( $J_{CC}$ ), la tension de circuit ouvert ( $V_{co}$ ), le facteur de forme (FF) et le rendement global ( $\eta$ ). Les tampons à large bande interdite, tels que Zn(S,O) et ZnS, ont permis une meilleure transmission du flux photonique vers la couche absorbante CIGS, favorisant ainsi une augmentation du  $J_{CC}$ . Parmi eux, Zn(S,O) s'est distingué par son équilibre optimal entre transparence optique, passivation interfaciale et alignement de bandes, ce qui a conduit à des performances supérieures. En revanche, les tampons conventionnels comme CdS ou ses dérivés (CdZnS, ZnSTe) ont montré une absorption plus importante des photons dans le bleu, limitant légèrement le  $J_{CC}$ , mais offrant parfois une meilleure stabilité de la jonction en raison de leur maturité technologique. Le compromis entre transparence, qualité d'interface et adéquation énergétique a donc été un facteur déterminant. Les résultats obtenus orientent clairement vers l'utilisation de tampons alternatifs comme Zn(S,O) pour des cellules tandem à haut rendement et à faible toxicité, tout en ouvrant des perspectives pour des optimisations futures en ingénierie d'interfaces. Les simulations ont également souligné que la température joue un rôle crucial dans les performances du dispositif, indiquant que des conditions thermiques appropriées sont essentielles pour maintenir un rendement optimale. En conclusion, ce travail propose une voie prometteuse pour le développement de cellules solaires tandem CIGS/Si, combinant des paramètres optimisés et des performances élevées. Ces résultats offrent une base théorique solide pour guider les efforts expérimentaux, avec des applications potentielles dans les énergies renouvelables, un domaine de plus en plus critique face à la demande mondiale croissante en énergie propre et durable.

**IV.5 Références bibliographiques du Chapitre IV**

- [1] P. Jackson et al., Prog. Photovolt. Res. Appl. 19, 894– 897 (2011).
- [2] I. Repins et al., paper presented at the 33rd IEEE Photovoltaic Specialists Conference San Diego, California, 11–16 (2008).
- [3] C. H. Huang, J. Phys. Chem. Solids, 69, 330–334 (2008).
- [4] K. Kim et al., Solar Energy, 155, 167–177 (2017).
- [5] S. Nacer and A. Aissat, Appl. Phys. A, 122:138 (2016).
- [6] B. Bibi et al., J. Computat. Electron., 20, 1769–1778 (2021).
- [7] K. Kim et al., Sol. Energy, 145, 52 (2017).
- [8] M. R. Mitroi et al., Int. J. Photoenergy, 7284367, 6 (2017).
- [9] P. Colter et al., Crystals, 8 (12) (2018).
- [10] M. Burgelman et al., Thin solid films, 361, 527–532 (2000).
- [11] A. Shalav, et al., Appl. Phys. Lett., 86 (1), 013505 (2005).
- [12] A. Soheili et al., Optik - International Journal for Light and Electron Optics 222, 0030–4026, (2020).
- [13] O. Skhouni et al, Eur. Phys. J. Appl. Phys, 74, 24602 (2016).
- [14] B. Zhou et al., Optical Materials, 110, 0925–3467 (2020).
- [15] K. Ramanathan, et al., Proceedings of the 38th IEEE Photovoltaic Specialists Conference (PVSC' 2012) Austin, Texas, USA (2012).
- [16] O. Lundberg et al., Thin Solid Films, 480, 520–525 (2005).
- [17] S. Shirakata et al., Sol. Energ. Mat. Sol. C, 93, 988–992 (2009).
- [18] M. Asaduzzaman et al., Springer Plus, 5, 578 (2016).
- [19] S.M. Sze and K.K. Ng, Physics of semiconductor devices, John wiley & Sons (2006).
- [20] S.R. Kodigala, Academic Press (2011).
- [21] A. Herguth, Energy Procedia, 124, 53–59 (2017).
- [22] K. Amri et al., Energies, 14, 3383 (2021).
- [23] C. W. Chen et al., J. Mater. Chem. A, 3 (29), 14985–14990 (2015).
- [24] J. Julayhi and T. Minemoto, Physica Status Solidi C, 10 (7), 1026–1030 (2013).
- [25] J. Li et al., paper presented at the 38th IEEE Photovoltaic Specialists Conference, Austin, TX, 1580–1583 (2012).
- [26] E. Klugmann-Radziemska, et al., Sol. Energ. Mat. Sol. C, 94, 2275–2282, (2010).
- [27] M. Valentini, et al., Sol. Energy, 190, 414 (2019).
- [28] M. Benaicha et al., J. Semicond. 41, 032701 (2020).

- [29] M. Isah et al, J. Alloy. Compd., 870, 15935 (2021).
- [30] F.M.T.Enam et al, Optik, 139, 397–406 (2017).
- [31] S. Sarker et al, Solar Energy, 225, 471–485 (2021).
- [32] H. Asif, et al, IEEE Region 10 Symposium (TENSYMP), Dhaka, Bangladesh, 1221–1224 (2020).
- [33] A. Hoque et al, Proceedings of the International Conference on Mechanical Engineering and Renewable Energy (ICMERE) Chittagong, Bangladesh (2019).

# **Conclusion générale**

La protection de l'environnement est aujourd'hui une préoccupation cruciale, ce qui a orienté de nombreuses recherches vers le développement des énergies renouvelables, notamment l'énergie solaire. Par ailleurs, différentes architectures de cellules solaires ont été explorées afin d'optimiser le compromis entre rendement de conversion et coût, se déclinant principalement en structures à homojonction ou à hétérojonction.

Dans cette étude, nous avons simulé des cellules solaires à simple jonction constituées de couches minces et de structures à hétérojonction à base de CIGS et de silicium, ainsi qu'une cellule solaire à double jonction (tandem) formée d'une sous-cellule supérieure en CIGS et d'une sous-cellule inférieure en silicium. Pour ce faire, nous avons utilisé le logiciel SCAPS-1D afin de modéliser les caractéristiques électriques de ces dispositifs photovoltaïques.

La simulation numérique de la cellule solaire Inférieure, basée sur la structure n-Si/p-Si/Mo, nous a permis de déterminer ses paramètres photovoltaïques. Les résultats obtenus sont les suivants : une densité de courant de court-circuit de  $36.85 \text{ mA/cm}^2$ , une tension en circuit de  $0,46 \text{ V}$ , un facteur de forme (FF) de  $76.54 \%$  et un rendement de conversion ( $\eta$ ) de  $13.16 \%$ . Ces valeurs concordantes. Ensuite, nous avons simulé la cellule solaire supérieure, constituée de ZnO/n-Zn(O,S)/p-CIGS, et avons obtenu les résultats suivants : une densité de courant de court-circuit de  $0.4485 \text{ mA/cm}^2$  de  $36.01 \text{ V}$ , un facteur de forme (FF) de  $73.15 \%$  et un rendement de conversion ( $\eta$ ) de  $11.63 \%$ .

Pour améliorer ces rendements, il est envisagé d'utiliser des cellules solaires à double jonction, ou des cellules tandem, afin d'exploiter l'ensemble du spectre solaire. Dans ce contexte, nous avons réalisé une simulation numérique d'une cellule solaire tandem de structure ZnO/n-Zn(O,S)/p-CIGS/n-Si/p-Si/Mo, où la cellule supérieure en CIGS et la cellule inférieure en silicium sont reliées optiquement et électriquement par un tunnel de jonction ( $p^{++}$ -CIGS/ $n^{++}$ -Si).

Les simulations indiquent que le courant de court-circuit ( $J_{CC}$ ) de la cellule tandem est limité par celui de la cellule inférieure en silicium, évalué à  $36.99 \text{ mA/cm}^2$ , une valeur quasiment identique à celle obtenue pour la cellule inférieure  $J_{CCb}$  ( $36.85 \text{ mA/cm}^2$ ). Par ailleurs, la tension à circuit ouvert ( $V_{CO}$ ) de la cellule tandem, qui est de  $0.9 \text{ V}$ , correspond exactement à la somme de la  $V_{COt}$  de la cellule supérieure ( $0.44 \text{ V}$ ) et de celle de la cellule inférieure  $V_{COb}$  ( $0.46 \text{ V}$ ). Ces résultats confirment le bon fonctionnement des cellules CIGS et Si lorsqu'elles sont connectées en série pour former la cellule tandem. De plus, le facteur de forme (FF) de la cellule tandem ( $76.93 \%$ ) est supérieur à celui de la cellule supérieure ( $73.15 \%$ ) et de la cellule inférieure ( $76.54 \%$ ). Il apparaît donc clairement que l'amélioration de la  $V_{CO}$  et du FF dans la configuration tandem conduit à un rendement accumulé de  $25.68 \%$  par rapport aux performances des cellules CIGS et Si.

Pour atteindre un rendement de conversion optimal dans une cellule solaire tandem, il est indispensable d'optimiser sa configuration. Pour ce faire, nous avons fait varier l'épaisseur de la couche supérieure en CIGS de 0.1  $\mu\text{m}$  à 4.5  $\mu\text{m}$  dans la structure tandem CIGS/Si, tandis que l'épaisseur de la cellule inférieure en silicium est maintenue constante à 450  $\mu\text{m}$ . L'augmentation de l'épaisseur de la couche CIGS conduit à une augmentation du courant de court-circuit de la cellule supérieure ( $J_{CCt}$ ) et à une diminution de celui de la cellule inférieure ( $J_{CCb}$ ), car la couche supérieure absorbe davantage de lumière, laissant ainsi moins de photons pour la cellule inférieure. Au fur et à mesure que l'épaisseur de la couche CIGS augmente, les courbes croissantes et décroissantes se rejoignent à une épaisseur optimale de 2  $\mu\text{m}$  pour CIGS, atteignant ainsi la condition d'égalité des courants ( $J_{CC} = J_{CCt} = J_{CCb}$ ).

Dans cette étude, nous avons analysé en détail les performances d'une cellule solaire tandem CIGS/Si intégrant différentes couches tampons : CdS, CdZnS, ZnS, ZnSTe et Zn(S,O). L'objectif était d'évaluer l'impact du choix du tampon sur les paramètres photovoltaïques essentiels : courant de court-circuit ( $J_{cc}$ ), tension de circuit ouvert ( $V_{co}$ ), facteur de forme (FF) et rendement ( $\eta$ ). Les tampons à large bande interdite, comme ZnS et Zn(S,O), ont favorisé une meilleure transmission photonique vers la couche CIGS, entraînant une augmentation du  $J_{cc}$ . Parmi eux, Zn(S,O) s'est démarqué par son excellent compromis entre transparence, passivation interfaciale et alignement de bandes, aboutissant aux meilleures performances. À l'inverse, les tampons conventionnels tels que CdS ou ses dérivés, malgré une absorption accrue dans le bleu limitant légèrement le  $J_{cc}$ , ont montré une bonne stabilité de la jonction. Ainsi, l'équilibre entre transparence, qualité d'interface et adéquation énergétique s'est révélé déterminant. Les résultats indiquent que des tampons alternatifs comme Zn(S,O) représentent une voie prometteuse pour développer des cellules tandem à haut rendement et à faible toxicité.

Enfin, nous avons examiné l'influence de la température sur les performances de la cellule solaire tandem optimisée (CIGS/Si) dans la plage de 300 K à 420 K. Les résultats de nos simulations démontrent qu'une élévation de la température induit une dégradation de la tension en circuit ouvert, du facteur de forme et du rendement de conversion de ces cellules. La diminution de la tension en circuit ouvert apparaît particulièrement marquée, surtout si l'on la compare à la faible augmentation du courant de court-circuit. Par ailleurs, nous avons constaté que la baisse de la tension en circuit ouvert en fonction de la température est à la fois linéaire et cumulative, et que les caractéristiques  $J(V)$  de la cellule tandem s'améliorent lorsque la température diminue, ainsi que la densité de courant augmente avec l'augmentation de la tension, notamment sur une plage allant de 300 K à 500 K.

**Résumé :** Dans cette thèse, nous avons étudié le comportement et l'optimisation des cellules solaires tandem CIGS/Si par simulation numérique, en nous concentrant spécifiquement sur l'impact de différentes couches tampons (CdS, CdZnS, ZnS, ZnSTe, Zn(S,O)) dans la cellule supérieure en CIGS. Après avoir établi les bases théoriques de la modélisation et de la simulation à l'aide du logiciel SCAPS-1D, nous avons évalué l'effet de l'épaisseur de l'absorbeur et de la couche tampon sur les principaux paramètres photovoltaïques, à savoir la densité de courant de court-circuit ( $J_{CC}$ ), la tension en circuit ouvert ( $V_{CO}$ ), le facteur de forme (FF) et le rendement global ( $\eta$ ). Les résultats ont montré que l'utilisation de couches tampons à large bande interdite, en particulier le Zn(S,O), améliore la transmission optique, réduit les pertes par recombinaison et conduit à des rendements plus élevés. Notamment, un rendement proche de 26 % a été atteint dans des conditions optimisées. Ce travail met ainsi en évidence l'importance cruciale du choix de la couche tampon dans l'optimisation des performances des cellules tandem, et ouvre des perspectives pour le développement de dispositifs à haut rendement et respectueux de l'environnement.

**Mots-clés :** Cellule multijonction, Couche tampon, SCAPS-1D, Rendement de conversion

**Summary:** In this thesis, we studied the behavior and optimization of CIGS/Si tandem solar cells through numerical simulation, focusing specifically on the impact of different buffer layers (CdS, CdZnS, ZnS, ZnSTe, Zn(S,O)) in the top CIGS cell. After establishing the theoretical foundations of modeling and simulation using SCAPS-1D software, we evaluated the effect of absorber and buffer layer thickness on key photovoltaic parameters, namely short-circuit current density ( $J_{sc}$ ), open-circuit voltage ( $V_{oc}$ ), fill factor (FF), and overall efficiency ( $\eta$ ). The results showed that using wide bandgap buffer layers, particularly Zn(S,O), enhances optical transmission, reduces recombination losses, and leads to higher efficiencies. Notably, an efficiency close to 26% was achieved under optimized conditions. This study highlights the critical importance of buffer layer selection in optimizing tandem cell performance and opens up prospects for developing high-efficiency, environmentally friendly photovoltaic devices.

**Keywords:** Multijunction cell, Buffer layer, SCAPS 1D , Conversion efficiency.

**ملخص:** في هذه الأطروحة، درسنا سلوك وخيارات تحسين خلايا الطاقة الشمسية الترادفية CIGS/Si من خلال المحاكاة العددية، مع التركيز بشكل خاص على تأثير استخدام طبقات الحاجز المختلفة (CdS، CdZnS، ZnS، ZnSTe، Zn(S,O)) في الخلية العلوية المصنوعة من CIGS. بعد وضع الأسس النظرية للنمذجة والمحاكاة باستخدام برنامج SCAPS-1D، قمنا بتقييم تأثير سُمك طبقتي الممتص والحاجز على المعلمات الكهروضوئية الرئيسية، وهي: كثافة تيار القصر ( $J_{sc}$ )، جهد الدائرة المفتوحة ( $V_{oc}$ )، معامل الامتلاء (FF)، والكفاءة الإجمالية ( $\eta$ ). أظهرت النتائج أن استخدام طبقات حاجز ذات فجوة طاقة واسعة، خصوصاً Zn(S,O)، يحسن النفاذية الضوئية، يقلل من خسائر إعادة الاندماج، ويؤدي إلى تحقيق كفاءات أعلى. ومن الجدير بالذكر أننا حققنا كفاءة تقترب من 26% تحت ظروف مثالية. يبرز هذا العمل الأهمية الحاسمة لاختيار طبقة الحاجز المناسبة في تحسين أداء الخلايا الترادفية، ويفتح آفاقاً لتطوير أجهزة طاقة شمسية عالية الكفاءة وصديقة للبيئة.

**الكلمات المفتاحية:** طبقة عازلة، SCAPS 1D، خلية متعددة الوصلات، كفاءة التحويل الطاقوي.