



UNIVERSITE
Abdelhamid Ibn Badis
MOSTAGANEM

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université de Mostaganem Abdelhamid Ibn Badis
Faculté des Sciences Exactes et d'Informatique
Département de Physique



FSEI



ECP3M

THÈSE DE DOCTORAT LMD

Présentée par

Zineb BENBOUZID

Pour l'obtention du grade de

Docteur en Physique

Spécialité : Energies Renouvelables et Sciences des Matériaux

Thème

**Matériaux et Méthodes pour l'Optimisation de la
Conversion d'Energie**

Devant le Jury composé de :

Soutenue le : **21/05/2024**

Nom & prénoms	Grade	Qualité	Affiliation
MESKINE Said	Pr	Président	UMAB
HAMID Azzedine	Pr	Examineur	CU-El Bayadh
RACHED Djaaffar	Pr	Examineur	USTO
SENOUCI Khaled	Pr	Examineur	UMAB
BENSTAALI Wafà	MCA	Encadrant	UMAB
HASSINI Nour Eddine	Pr	Co-Encadrant	UMAB

Année Universitaire : 2023-2024

Remerciements

La présente thèse a pu voir le jour grâce à l'immense pouvoir d'ALLAH.

Pendant les quatre années de mon parcours de thèse, j'ai eu le privilège d'être membre du laboratoire dynamique de Développement et Caractérisation des Matériaux Physico-Mécaniques et Métallurgiques (ECP3M). Cette période était bien plus qu'une simple aventure académique – c'était une exploration dynamique dans le monde de la recherche. Chaque jour apportait de nouvelles perspectives et des expériences collaboratives qui enrichissaient ma compréhension. Je suis reconnaissant d'avoir travaillé aux côtés d'individus exceptionnels qui ont rendu ces quatre années à la fois éducatives et agréables. Ces mots sont un témoignage sincère de ma gratitude envers les personnes exceptionnelles qui ont embelli ce chapitre de ma vie académique.

Tout d'abord, Je souhaite exprimer ma profonde gratitude envers mes directeurs de thèse, le *Dr BENSTALLI Wafà* et le *Pr HASSINI Noureddine*, enseignants à l'Université de Mostaganem UMAB, pour leur contribution essentielle tout au long du développement de mon projet de thèse. Leurs conseils éclairés, un soutien constant et un accompagnement bienveillant ont joué un rôle déterminant dans la réussite de mon travail.

Je tiens à souligner spécifiquement leur disponibilité, leur motivation et leur sens remarquable de l'organisation de cette thèse. Grâce à leur soutien continu, j'ai pu progresser de manière significative et mener à bien ce travail. Cette expérience a été enrichissante et a renforcé mes compétences académiques.

Je souhaite à mes directeurs de thèse une carrière longue et brillante, et je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance pour leur contribution indéniable à mon parcours académique.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude envers tous les membres du jury qui ont accepté de prendre le temps d'évaluer ma thèse et de se déplacer pour assister à ma soutenance.

Je souhaite exprimer toute ma gratitude envers le *Pr MESKINE Saïd* de l'Université de Mostaganem UMA pour sa disponibilité et son engagement en acceptant de présider le jury de cette thèse. Sa participation a grandement enrichi le processus et a contribué à la qualité globale de cette recherche.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude envers *Pr SENOUCI Khaled* de l'Université de Mostaganem UMAB, pour sa précieuse contribution à la lecture de ce travail. Sa générosité en termes de temps et d'efforts est grandement appréciée. Je suis profondément reconnaissante pour leur précieuse contribution à cette étape de mon parcours académique.

Je souhaite exprimer ma gratitude sincère envers le *Pr HAMID Azzedine* de l'Université d'El Bayadh Nour El Bachir pour son déplacement, sa disponibilité, son temps dévoué à la lecture de ce manuscrit, et son engagement précieux dans l'évaluation de ma thèse. Leur contribution à cette phase de mon parcours académique est inestimable.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude envers *Pr RACHED Djaaffar* de l'Université des Sciences et de la Technologie d'Oran USTO, son déplacement, sa disponibilité, et son engagement à examiner ma thèse

sont d'une valeur inestimable. Je suis profondément reconnaissante pour la précieuse contribution qu'ils apportent à cette étape de mon parcours académique.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude envers *Pr RAHAL Wassila Leïla*, dont l'enseignement m'a apporté des connaissances enrichissantes et des émotions positives. Mes remerciements les plus sincères pour son soutien inestimable et sa motivation constante et exceptionnel et porteur de sens pour moi. J'apprécie grandement l'empreinte profonde qu'elle a laissée sur moi.

Je souhaite exprimer ma profonde gratitude envers le *Pr KHEIRI Abdelhamid* de l'Université de Lorraine, Laboratoire d'Énergétique et de Mécanique Théorique et Appliquée, qui m'a apporté une aide précieuse tout au long de mon stage au sein du laboratoire LAMTA. Ses conseils éclairés et son soutien constant ont grandement contribué à enrichir mon expérience.

Je tiens également à exprimer ma gratitude sincère envers le *Pr BOUKORTT Abdelkader*, directeur de notre laboratoire de recherche et *Dr BENZIDANE Mohammed Ridha*, membre de notre laboratoire. Je suis vraiment reconnaissante pour leur expertise, leur dévouement et l'esprit collaboratif qui ont enrichi l'élaboration de cette thèse.

Mes remerciements vont aussi à tous mes enseignants de la Faculté des Sciences Exactes et de l'Informatique, en particulier *Pr BOUKRA Abdelaziz*, *Dr BENCHERIF Yamina* et *Pr HENTIT Hafida*, pour leur précieuse expertise et leurs conseils éclairés dispensés.

BENBOUZID Zineb

DEDICACES

A mon Cher père

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude pour tout le soutien moral et matériel que tu m'as apporté jusqu'à ce jour. Votre amour inconditionnel et tes encouragements ont été une source d'inspiration inestimable pour moi. Que ce travail soit un modeste témoignage de l'affection et de la tendresse que je te porte.

Qu'ALLAH le Tout-Puissant te préserve, te donne santé et bonheur, et te protège de tout mal.

A ma Chère mère

Les mots semblent insuffisants pour exprimer l'amour et l'affection que je ressens envers vous. Ta tendresse et ton soutien indéfectible ont illuminé chaque étape de mon parcours. Durant toutes ces années d'études, tu as été ma source constante d'encouragement. Qu'ALLAH veille sur toi, te comble de santé, de bonheur, et t'accorde une vie longue et épanouissante.

À l'attention de mon grand-père et mes deux grandes mères

Je tiens à exprimer tout mon respect envers vous. Votre présence constante dans ma vie, marquée par vos paroles bienveillantes, vos encouragements et vos conseils inestimables ont toujours été d'une grande valeur pour moi. Qu'Allah vous protège et veille sur vous pour nous.

À ma sœur Hayet et à mon frère Sadek, dont l'affection occupe une place singulière dans mon cœur.

Pour leur encouragement et leurs petits mots.

Je conclus en dédiant ce travail à mon conjoint, Mohammed Ridha Benzidane, qui a été une source de lumière et de motivation tout au long de ces trois années couronnées de réussite.

Un grand merci à vous tous

Résumé

L'énergie constitue un moteur essentiel du développement des nations et demeure un pilier fondamental de l'économie moderne. La préoccupation croissante quant aux impacts environnementaux et aux limites des ressources fossiles a incité les chercheurs ainsi que les industriels à explorer des alternatives plus durables ; les énergies renouvelables. La conversion de l'énergie renouvelable est un aspect crucial de cette transition énergétique. Elle englobe différentes méthodes, chacune adaptée à des sources spécifiques. L'énergie solaire photovoltaïque se distingue comme une option particulièrement prometteuse avec ses différentes structures. Parmi elles, les cellules solaires au cuivre-indium-gallium-diséléniure (CIGS) ont suscité un intérêt considérable en raison de leur fort coefficient d'absorption, leur potentiel de rendement élevé, leur évolutivité et de leur compatibilité avec des applications flexibles et légères. Cependant, les couches inorganiques traditionnellement utilisées dans les cellules solaires CIGS (Comme l'indium, le gallium et le cadmium) présentent des limitations, notamment en termes de toxicité et de rareté des éléments constitutifs.

Cette thèse vise à étudier les performances photovoltaïques des cellules solaires à base CIGS à l'aide du logiciel de simulation de capacité de cellule solaire en une dimension (SCAPS-1D) pour de nouveaux matériaux non toxiques à rendement élevé. Nous avons commencé par comparer les performances de trois matériaux (Zn(O, S), ZnSe, SnS₂) au CdS dans la couche tampon afin de remplacer ce dernier. L'ajout d'une couche de champ de surface arrière (BSF) permet, non seulement, l'augmentation du rendement énergétique de la cellule, mais la réduction de l'épaisseur de la couche absorbante CIGS, qui contient, des éléments potentiellement toxiques pour l'environnement. L'ajout de la couche BSF (SnS) entre la couche absorbante CIGS et le contact arrière métallique en molybdène (Mo) améliore la région de champ électrique générée au niveau de l'interface arrière et réduit par conséquent la recombinaison de la surface arrière en augmentant l'efficacité de la conversion d'énergie. Suite à la sélection des couches ETL et BSF appropriées, nous avons optimisé les paramètres de ces différentes couches de notre structure SLG/Mo/SnS/CIGS/SnS₂/AZO/Al dans le but d'obtenir un bon rendement de conversion énergétique.

Dans le cadre d'une étude complémentaire, nous avons substitué la couche inorganique absorbante CIGS par une couche organique de nanotubes de carbone SWCNTs, que nous avons optimisée. Les résultats obtenus sont particulièrement encourageants indiquant une perspective favorable pour ce type de cellules solaires dans le futur.

Abstract

Energy constitutes an essential driver of national development and remains a fundamental pillar of the modern economy. Growing concern about environmental impacts and the limitations of fossil resources has prompted researchers and industries to explore more sustainable alternatives; renewable energies. The conversion of renewable energy is a crucial aspect of this energy transition. It encompasses various methods, each tailored to specific sources. Photovoltaic solar energy stands out as a particularly promising option with its different structures. Among them, copper-indium-gallium-diselenide (CIGS) solar cells have attracted considerable interest due to their high absorption coefficient, potential for high efficiency, scalability, and compatibility with flexible and lightweight applications. However, the inorganic layers traditionally used in CIGS solar cells (such as indium, gallium, and cadmium) have limitations, notably in terms of toxicity and the scarcity of constituent elements.

This thesis aims to study the photovoltaic performance of CIGS-based solar cells using one-dimensional solar cell capacity simulation software (SCAPS-1D) for new non-toxic, high-efficiency materials. We began by comparing the performance of three materials (Zn(O, S), ZnSe, SnS₂) to CdS in the buffer layer to replace the latter. The addition of a rear surface field (BSF) layer not only increases the energy efficiency of the cell but also reduces the thickness of the CIGS absorber layer, which contains potentially toxic elements for the environment. Adding the BSF layer (SnS) between the CIGS absorber layer and the molybdenum (Mo) metallic back contact enhances the electric field region generated at the back interface and consequently reduces back surface recombination, increasing energy conversion efficiency. Following the selection of appropriate ETL and BSF layers, we optimized the parameters of these different layers in our SLG/Mo/SnS/CIGS/SnS₂/AZO/Al structure to achieve good energy conversion efficiency.

As part of a complementary study, we substituted the inorganic CIGS absorber layer with an organic layer of single-walled carbon nanotubes (SWCNTs), which we optimized. The results obtained are particularly encouraging, indicating a favorable outlook for this type of solar cells in the future.

ملخص

الطاقة تشكل محركاً أساسياً لتنمية الدول وتبقى دعامة أساسية للاقتصاد الحديث. القلق المتزايد بشأن الآثار البيئية وحدود الموارد الأحفورية دفع الباحثين والصناعيين لاستكشاف بدائل أكثر استدامة؛ الطاقات المتجددة. تحويل الطاقة المتجددة بشكل جانباً حاسماً في هذه الانتقال الطاقوي. إنه يشمل أساليب مختلفة، كل واحدة مصممة لمصادر محددة. طاقة الشمس الضوئية تبرز كخيار مُشجع بشكل خاص بفضل هياكلها المختلفة. من بينها، أثارت خلايا الطاقة الشمسية بالنحاس والإنديوم والغالسيوم والديسيلينيوم (CIGS) اهتماماً كبيراً بفضل معامل امتصاصها العالي، وإمكانية تحقيق كفاءة عالية، وتطويرها المستدام، وتوافقها مع التطبيقات المرنة والخفيفة. ومع ذلك، فإن الطبقات اللاعضوية المستخدمة تقليدياً في خلايا الطاقة الشمسية CIGS (مثل الإنديوم والغالسيوم والكاميوم) تعاني من قيود، لا سيما فيما يتعلق بالسمية وندرة العناصر المكونة.

تهدف هذه الأطروحة إلى دراسة الأداء الكهروضوئي للخلايا الشمسية مصنعة من سيلينيد النحاس والإنديوم والجاليوم (CIGS) باستخدام برنامج محاكاة كفاءة الخلية الشمسية في بعد أحادي (SCAPS – 1D). قمنا بدراسة طبقات الواسدة مختلفة (CdS، SnS₂، ZnSe، Zn (O, S)) بهدف تحقيق كفاءة عالية باستخدام مادة غير سامة. بعد ذلك، أضفنا طبقات مختلفة من مجال السطح الخلفي (BSF) لتعزيز كفاءة الطاقة في الخلية المدروسة. سمح هذا التعديل أيضاً بتقليل سمك الطبقة الممتصة لـ CIGS، التي تحتوي على عناصر الغاليوم والإنديوم التي قد تكون سامة للبيئة. ركز اختيارنا على تطبيق كبريتيد القصدير الصفائحي (SnS₂) كطبقة عازلة وأحادي كبريتيد القصدير (SnS) كطبقة مجال السطح الخلفي (BSF)، وهو أمر رائع حيث تم استكشاف عدد قليل من المواد من قبل في الخلايا الشمسية CIGS. تؤدي إضافة طبقة (SnS) BSF بين الطبقة الامتصاصية CIGS والاتصال الخلفي المعدني للمولبيدينوم (Mo) إلى تحسين منطقة المجال الكهربائي المتولدة في الواجهة الخلفية وبالتالي تقليل إعادة تركيب السطح الخلفي، مما يزيد من كفاءة تحويل الطاقة، حيث حققنا كفاءة تحويل بنسبة 30.87%، مع ما يقرب من 31% باستخدام سمك 1 ميكرومتر من طبقة CIGS غير العضوية.

وفي دراسة تكيميلية، استبدلنا الطبقة الممتصة من CIGS غير العضوية بطبقة عضوية من أنابيب الكربون النانوية أحادية الجدار (SWCNTs)، والتي قمنا بتحسينها. وكانت النتائج التي تم الحصول عليها واعدة بشكل خاص، حيث أظهرت كفاءة تحويل تبلغ 22.65% بسمك 4 ميكرومتر. تشير هذه البيانات المشجعة إلى توقعات إيجابية فيما يتعلق بالكفاءة والجدوى الاقتصادية للخلايا الشمسية المعتمدة على SWCNT في المستقبل.

Sommaire

Chapitre I : Introduction à la conversion d'énergie

Introduction Générale	1
I. Chapitre	5
I.1. Introduction.....	6
I.2. Les énergies renouvelables et leurs processus de conversion	8
I.2.1. Énergie éolienne.....	9
I.2.2. Énergie hydraulique.....	10
I.2.3. Énergie marine.....	10
I.2.4. Énergie géothermique	11
I.2.5. Énergie issue de la biomasse.....	12
I.2.6. Énergie solaire	14
I.3. Conversion photovoltaïque de l'énergie solaire : Principe d'une cellule solaire	15
I.3.1. Interaction Rayonnement/semi-conducteur (Absorption de la lumière).....	16
I.3.2. Transfert de l'énergie du photon aux charges électriques.....	19
I.3.3. Collecte des charges électriques	21
a) Champ électrique	21
b) Bande d'énergie d'une hétérojonction	24
I.3.4. Génération-Recombinaison	26
I.4. Évolution des différentes générations de cellules solaires.	28
I.4.1. Début des cellules solaires en silicium	30
I.4.2. Progrès ultérieur avec les cellules solaires à couches minces.	30
I.4.3. Continuation du développement avec les cellules solaires émergentes.....	32
I.4.4. Les dernières avancées dans les cellules solaires(hybrides).	33
I.5. Intérêt des chalcopyrites à couche mince	33
I.6. Les cellules solaires à base des composés CIGS.....	36
I.6.1. Substrat.....	37
I.6.2. Contact arrière	38
I.6.3. Contact avant	39
I.6.4. Couche fenêtre.....	39
I.6.5. Couche tampon.....	39
I.6.6. Couche absorbante.....	40
I.7. Utilisation du logiciel SCAPS-1D et caractérisation de la cellule	41
I.8. Conclusion.....	44

Chapitre II : Choix des matériaux des couches ETL et BSF de la cellule solaire à base de CIGS

II.1. Introduction.....	49
II.2. Présentation de la cellule photovoltaïque étudiée	50
II.3. Etude comparative de divers couches tampon	51
II.3.1. Effet de l'épaisseur de la couche absorbante CIGS	52
II.3.2. Différents diagrammes de bande de la cellule CIGS.....	55
II.4. Etude comparative de divers couches BSFs	57
II.4.1. Intérêt d'une couche BSF.....	57
II.4.2. Présentation de la cellule SnS ₂ /CIGS/BSF.	58
II.4.3. Effet de l'épaisseur de la couche CIGS avec divers BSF.....	59
II.4.4. Diagramme de bande de la cellule CIGS avec divers BSF	62
II.5. Conclusion.....	65

Chapitre III : Optimisation de la Cellule Inorganique à Base de CIGS avec ETL(SnS₂) et BSF (SnS)

III.1.Introduction	71
III.2.Présentation de la structure SLG/Mo/SnS/CIGS/SnS ₂ /AZO/Al	71
III.3.Optimisation de la couche BSF(SnS).....	73
III.3.1. Effet de l'épaisseur de la couche de BSF(SnS) sur la performance des cellules CIGS.....	73
III.3.2. Effet de la concentration de l'accepteur de la couche BSF (SnS) sur la performance de la cellule CIGS.	76
III.3.3. Effet de l'énergie de gap de la couche BSF (SnS) sur les performances des cellules CIGS.....	79
III.4.Caractéristiques du dispositif solaire avec et sans BSF(SnS).....	81
III.5.Optimisation de la couche absorbante.....	83
III.5.1. Optimisation de la concentration de dopage de la couche CIGS.....	84
III.5.2. Optimisation de l'énergie de gap E _g de la couche CIGS	86
III.6.Optimisation de la couche tampon SnS ₂	92
III.6.1. Optimisation de l'épaisseur de la couche SnS ₂	92
III.6.2. Optimisation de la concentration de dopage de la couche SnS ₂	94
III.6.3. Optimisation de l'énergie de gap de la couche SnS ₂	98
III.7.Comparaison des caractéristiques de plusieurs travaux étudiés.	100
III.8.Conclusion	102

Chapitre IV : Étude de performance : Remplacement de la couche absorbante CIGS par une couche organique SWCNTs

IV.1.Introduction	109
IV.2.Motivation de l'utilisation des SWCNTs comme couche absorbante.....	110
IV.3.Présentation de la cellule à base de SWCNTs	113
IV.4.Optimisation de la Couche SWCNTs	114
IV.4.1. Effet de l'épaisseur de la couche absorbante sur les performances de la cellule.....	114
IV.4.2. Effet du dopage N_A de la couche SWCNTs sur les performances de la cellule.....	116
IV.4.3. Effet de l'énergie de gap E_g de la couche SWCNTs sur les performances de la cellule.....	118
IV.4.4. Effet de la température sur les performances de la cellule organique SWCNTs ..	122
IV.5.Comparaison des trois structures étudiées :	125
IV.6.Comparaison des résultats (Simulation /Expérimentale)	128
IV.7.Conclusion	129
Conclusion générale	135

Liste des Figures

Figure I. 1: Investissement mondial dans les énergies renouvelables et non renouvelables (2015–2023)	7
Figure I. 2 : Accroissement annuel de la capacité de production d'énergies renouvelables en vue d'atteindre les objectifs de zéro émission en 2030 et 2050.	8
Figure I. 3: Différents énergies renouvelables.....	9
Figure I. 4: Augmentation annuelle de la capacité mondiale d'énergie éolienne, 2011-2021.	9
Figure I. 5: Évolution annuelle de la capacité solaire photovoltaïque mondiale, 2011-2021,	14
Figure I. 6 : Etapes de principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque	16
Figure I. 7 : Trois phénomènes associés au photon incident : réflexion, transmission et absorption	17
Figure I. 8: Deux schématisation du gap énergétique (a) direct (a) et (b) indirect.	18
Figure I. 9 : Schématisation des bandes énergétiques d'un isolant, d'un semi-conducteur et d'un Métal.....	19
Figure I. 10: Processus de formation d'une paire électron-trou.....	20
Figure I. 11 : Diagramme de bande et principe d'une jonction PN (cas d'une homo-jonction)	22
Figure I. 12: Schéma du principe d'une cellule solaire	23
Figure I. 13: Création de la ZCE par la diffusion e^- et h^+ au niveau de la jonction PN	24
Figure I. 14: Diagramme schématique de la façon dont les alignements de bandes sont prédits à l'aide de la règle d'Anderson avec (a) Alignements naturels référencés au niveau de vide et (b) Alignement des bandes après avoir aligné les niveaux de Fermi.....	25
Figure I. 15: Mécanismes principales de recombinaison (radiatives et Auger et Shockley-Read-Hall (SRH))	27
Figure I. 16 : Représentation de différentes familles de cellules solaires.....	29
Figure I. 17: Évolution des performances records en photovoltaïque	29
Figure I. 18 :Limite de Shockley-Queisser pour divers matériaux photovoltaïques. Ce graphique est utilisé avec l'autorisation de	32

Figure I. 19: Record d'efficacité pour diverses technologies commerciales et émergentes de couches minces sur substrats rigides et flexibles et pour les architectures semi-transparentes	35
Figure I. 20: Record d'efficacité en fonction d'année pour quatre technologies photovoltaïques à jonction unique	35
Figure I. 21: Configuration de la cellule solaire à base de CIGS.....	37
Figure I. 22 : Caractéristiques J(V) d'une cellule solaire	42
Figure II. 1 : Cellule solaire CIGS avec différentes couches tampon.	50
Figure II. 2 : Impact de l'épaisseur de la couche absorbante avec différentes couches tampon sur les performances de la cellule.	52
Figure II. 3 : Variation du taux de recombinaison pour divers ETLs (Zn (O, S), SnS ₂ , CdS,ZnSe).	54
Figure II. 4 : Variation du taux de génération pour divers ETLs (Zn (O, S), SnS ₂ , CdS,ZnSe)	54
Figure II. 5 : Différents diagramme de bande d'énergie pour divers ETLs(Zn (O, S), SnS ₂ , CdS,ZnSe).....	56
Figure II. 6 : Cellule solaire CIGS avec différents BSF	58
Figure II. 7 : Impact de l'épaisseur de la couche absorbante avec différents BSFs sur les performances de la cellule.	60
Figure II. 8 : Variation du champ électrique pour divers HTLs (CuInSe ₂ , SnS et MoSe ₂).....	62
Figure II. 9 : Différents diagramme de bande d'énergie pour divers HTMs(CuInSe ₂ , SnS et MoSe ₂)	64
Figure III. 1 : Schéma du dispositif solaire proposé à base de CIGS.	72
Figure III. 2 : Structure du diagramme de bande de la cellule solaire CIGS étudiée avec BSF.	73
Figure III. 3 : Effet de l'épaisseur de la couche BSF (SnS) sur les performances du dispositif solaire. (a) Variation de V _{oc} et J _{sc} . (b) Variation de FF et PCE.....	75
Figure III. 4 : Caractéristique J-V des cellules solaires à base de CIGS pour différentes épaisseurs de la couche BSF (SnS).....	75
Figure III. 5 : Rendement quantique des cellules solaires à base de CIGS pour différentes épaisseurs de la couche BSF (SnS).	76
Figure III. 6 : Effet de la densité de l'accepteur BSF (SnS) sur la performance du dispositif solaire. (a) Variation de Voc et Jsc. (b) Variation FF et PCE	77
Figure III. 7 : Caractéristique J-V des cellules solaires à base de CIGS avec BSF (SnS) pour différentes densités d'accepteurs.	78
Figure III. 8 : Champ électrique pour une cellule solaire CIGS avec deux valeurs de densité d'accepteurs.....	78
Figure III. 9 : Rendement quantique des cellules solaires à base de CIGS avec BSF (SnS) pour différentes densités d'accepteurs.	78
Figure III. 10 : Variation des performances du dispositif en fonction de l'énergie de l'énergie de gap de la couche BSF (SnS). (a) Voc et Jsc. (b) FF et PCE	80
Figure III. 11 : Champ électrique pour une cellule solaire CIGS avec différentes énergies de gap de la couche BSF (SnS).....	80
Figure III. 12 : Caractéristique J-V d'une cellule solaire CIGS avec et sans couche BSF (SnS).....	82
Figure III. 13 : Champ électrique pour une cellule solaire CIGS avec et sans couche BSF (SnS) ..	82
Figure III. 14 : Taux de recombinaison pour une cellule solaire CIGS avec et sans couche BSF (SnS)	82
Figure III. 15 : Rendement quantique d'une cellule solaire CIGS avec et sans couche BSF (SnS)	83
Figure III. 16 : Effet de la densité de l'accepteur CIGS avec et sans BSF sur la performance du dispositif solaire (V _{oc} ,J _{sc} ,FF,PCE).	84
Figure III. 17 (a,b,c,d) :Champs électrique pour la cellule CIGS avec et sans BSF(a,b) et (c,d) taux de recombinaison avec et sans BSF pour deux valeurs du dopage N _A de la couche active.....	85
Figure III. 18 : Effet de l'énergie de gap CIGS avec et sans BSF sur la performance du dispositif solaire (V _{oc} ,J _{sc} ,FF,PCE).	87

Figure III. 19 : Champs électrique pour la cellule CIGS avec et sans BSF(a,b) et (c,d) taux de recombinaison avec et sans BSF pour deux valeurs de l'énergie de gap de la couche active	88
Figure III. 20 : Diagramme de bande pour une cellule solaire CIGS (a) avec BSF et (b) sans BSF pour deux valeurs différentes de l'énergie de gap de la couche active	89
Figure III. 21 : Rendement quantique pour une cellule solaire CIGS (a) avec BSF et (b) sans BSF pour deux valeurs différentes de l'énergie de gap de la couche active	91
Figure III. 22 : Effet de l'épaisseur de la couche tampon avec BSF sur la performance du dispositif solaire. (a) Variation de Voc et Jsc. (b) Variation FF et PCE	92
Figure III. 23 : Taux de recombinaison pour une cellule solaire CIGS avec BSF pour différentes valeurs de l'épaisseur de la couche tampon	93
Figure III. 24 : Rendement quantique pour une cellule solaire CIGS avec BSF pour différentes valeurs de l'épaisseur de la couche tampon	94
Figure III. 25 : Effet de la densité de dopage N_D de la couche tampon avec BSF(SnS) sur la performance du dispositif solaire. (a) Variation de Voc et Jsc. (b) Variation FF et PCE.....	95
Figure III. 26 : Champs électrique pour une cellule solaire CIGS avec BSF pour deux valeurs de dopage N_D de la couche tampon.....	96
Figure III. 27 : Taux de recombinaison pour une cellule solaire CIGS avec BSF pour deux valeurs de dopage N_D de la couche tampon.....	97
Figure III. 28 : Effet de l'énergie de gap de la couche tampon avec BSF(SnS) sur la performance du dispositif solaire. (a) Variation de Voc et Jsc. (b) Variation FF et PCE.....	98
Figure III. 29 : Champs électrique pour une cellule solaire CIGS avec BSF pour deux valeurs de l'énergie de gap E_g de la couche tampon.....	99
Figure III. 30 : Taux de recombinaison pour une cellule solaire CIGS avec BSF pour deux valeurs de l'énergie de gap E_g de la couche tampon.....	100
Figure IV. 1 : Cellule solaire à base du matériau organique SWCNTs.....	113
Figure IV. 2 : Effet de l'épaisseur de la couche SWCNTs sur la performance du dispositif solaire. (a) Variation de Voc et Jsc. (b) Variation FF et PCE	114
Figure IV. 3: Taux de recombinaison pour différentes valeurs de l'épaisseur de la couche SWCNTs	115
Figure IV. 4 : Effet de la densité de l'accepteur SWCNTs sur la performance du dispositif solaire. (a) Variation de V_{oc} et J_{sc} . (b) Variation FF et PCE.....	116
Figure IV. 5 : Champ électrique pour différentes valeurs de dopage N_A de la couche SWCNTs ...	117
Figure IV. 6 : Taux de recombinaison pour différentes valeurs de dopage de la couche SWCNTs	118
Figure IV. 7: Effet de l'énergie de gap de la couche SWCNTs sur la performance du dispositif solaire. (a) Variation de V_{oc} et J_{sc} . (b) Variation FF et PCE.....	119
Figure IV. 8 : Champ électrique pour différentes valeurs de gap de la couche SWCNTs.....	120
Figure IV. 9 : Diagramme de bande d'énergie pour différentes valeurs de gap de la couche SWCNTs	120
Figure IV. 10 : Taux de recombinaison pour différentes valeurs de gap de la couche SWCNTs ...	121
Figure IV. 11 : Rendement quantique pour différentes valeurs de gap de la couche SWCNTs	121
Figure IV. 12 : Effet de la température sur les performances du dispositif solaire SWCNTs. (a) Variation de V_{oc} et J_{sc} . (b) Variation FF et PCE	123
Figure IV. 13 : Taux de recombinaison pour différentes valeurs de température de la cellule SWCNTs	124
Figure IV. 14: Champs électrique pour différentes valeurs de température de la cellule SWCNTs	124
Figure IV. 15: Caractéristique J-V des trois différents structures.....	125
Figure IV. 16: Rendement quantique des trois différents structures	127

Liste des Tableaux.

Tableau I. 1: Efficacité des différentes cellules de deuxième génération.....	31
Tableau I. 2 : Efficacité des différentes cellules de troisième génération	33
Tableau II. 1 : Paramètres physiques de la cellule CIGS avec différents tampons	51
Tableau II. 2 Paramètres physiques de la cellule étudiée avec différents BSF	59
Tableau III. 1 : Paramètres d'entrée SCAPS pour la configuration initiale de l'appareil à 300K ..	72
Tableau III. 2 : Résultats de la simulation avec et sans couche SnS-P ⁺	83
Tableau III. 3 : Analyse des caractéristiques de plusieurs travaux étudiés	101
Tableau IV.1: Paramètres physiques de la cellule solaire à base de matériau organique SWCNTs.	113
Tableau IV. 2: Résumé des résultats des trois différents structures après optimisation	126
Tableau IV. 3: Comparaison des caractéristiques photovoltaïques.....	128

Introduction générale

L'énergie constitue un moteur essentiel du développement des nations et demeure un pilier fondamental de l'économie moderne. Elle représente l'impulsion nécessaire à l'accomplissement de toute activité humaine. Traditionnellement, les sociétés dépendent largement des énergies fossiles, telles que le pétrole, le charbon et le gaz naturel, pour répondre à leurs besoins énergétiques. Cependant, la préoccupation croissante quant aux impacts environnementaux et aux limites des ressources fossiles les a incités à explorer des alternatives plus durables. Dans cette quête de solutions énergétiques, les chercheurs et les industriels se sont tournés vers les énergies renouvelables. Ces sources d'énergie, telles que la géothermie, l'énergie éolienne, hydraulique, marine, la biomasse et l'énergie solaire, offrent des avantages significatifs en termes de respect et durabilité environnementaux, et sont caractérisées par leur capacité à se régénérer naturellement et à être exploitées de manière durable.

Dans sa nouvelle politique énergétique, le gouvernement Algérien a mis en place plusieurs mesures pour développer l'industrie des énergies renouvelables et la rendre, économiquement viable et compétitive par rapport aux combustibles fossiles. L'Algérie a franchi une grande étape vers l'énergie propre en s'engageant dans un nouveau programme ambitieux pour l'énergie durable. Dans sa version mise à jour, ce programme prévoit l'installation d'une puissance renouvelable de 4 GW d'ici fin 2024 pour le marché national, tout en maintenant l'option d'exportation comme objectif stratégique. Le développement de cette industrie est une avancée positive pour le pays. Cela contribue à réduire la dépendance de l'Algérie vis-à-vis des combustibles fossiles, la création des emplois et la stimulation de l'économie.

La conversion de l'énergie renouvelable est un aspect crucial de cette transition énergétique. Elle englobe différentes méthodes, chacune adaptée à des sources spécifiques. L'énergie solaire photovoltaïque se distingue comme une option particulièrement prometteuse parmi les énergies renouvelables. Cette énergie connaît actuellement un développement considérable à travers le monde, y compris en Algérie. Ce développement est stimulé par les politiques internationales et nationales visant à réduire l'utilisation des combustibles fossiles, conformément aux objectifs de la Conférence des Nations Unies sur les changements climatiques de 2021 (COP26). Les cellules solaires, également connues sous le nom de dispositifs photovoltaïques, jouent un rôle essentiel dans la conversion de la lumière du soleil en électricité. Les avancées

continues dans la technologie des cellules solaires ont permis d'améliorer leur rendement et de réduire leurs coûts, rendant ainsi l'énergie solaire attrayante pour répondre à nos besoins énergétiques.

Les cellules solaires sont des dispositifs semi-conducteurs qui exploitent l'effet photovoltaïque pour convertir directement la lumière du soleil en électricité. Elles sont construites à partir de divers matériaux et configurations, chacun présentant des caractéristiques uniques et des performances spécifiques. Parmi elles, les cellules solaires au cuivre-indium-gallium-diséléniure (CIGS) ont suscité un intérêt considérable en raison de leur fort coefficient d'absorption, leur potentiel de rendement élevé, leur évolutivité et de leur compatibilité avec des applications flexibles et légères. Ces cellules permettent d'atteindre de hauts rendements dépassant les 23.6% selon le Laboratoire national des énergies renouvelables (NREL). Cependant, les couches inorganiques traditionnellement utilisées dans les cellules solaires CIGS (Comme l'indium, le gallium et le cadmium) présentent des limitations, notamment en termes de toxicité et de rareté des éléments constitutifs. Ces matériaux soulèvent des préoccupations quant à la durabilité à long terme de ces technologies et à la capacité de production à grande échelle et leur impact environnemental. Face à ces défis, la recherche s'oriente vers l'exploration de matériaux et d'approches alternatives susceptibles d'améliorer les performances des cellules solaires CIGS tout en remédiant à ces inconvénients.

L'objectif de cette thèse est donc de remplacer les matériaux utilisés dans les différentes couches d'une cellule à base de CIGS par d'autres disponibles, peu coûteux et respectueux de l'environnement ; Divers matériaux seront analysés. L'étude de l'effet des paramètres géométriques et électriques des trois couches (émetteur, absorbeur et BSF) sur les performances de la cellule nous permettra de trouver les conditions optimales de fonctionnement. Une avenue de recherche intéressante consiste à explorer l'utilisation d'une couche organique extraite de matériaux issus de la biomasse en tant qu'alternative à la couche inorganique traditionnelle utilisée dans les cellules solaires CIGS. Les nanotubes de carbone SWCNTs dérivés de la biomasse sont notamment un candidat prometteur pour l'intégration de couche absorbante. Les SWCNTs possèdent des propriétés électriques et optiques remarquables, et leur compatibilité avec des procédés de fabrication basés sur des solutions permet des méthodes de fabrication à faible coût. En remplaçant les matériaux inorganiques par

des matériaux organiques, il est donc possible d'améliorer considérablement la faisabilité économique de la production de cellules solaires. Durant notre étude, nous mettrons l'accent sur les différents phénomènes qui ont lieu dans ce type de dispositif et les voies de leur amélioration afin de comprendre les mécanismes engendrés et éventuellement d'orienter les réalisations expérimentales de cellules solaires à haut rendement.

La thèse est structurée en quatre chapitres principaux.

Le premier chapitre aborde les diverses méthodes de conversions d'énergie renouvelable, avec une focalisation particulière sur l'énergie solaire. Nous passerons par l'explication du principe de fonctionnement d'une cellule solaire avec les principaux phénomènes physiques la régissant. Ensuite, nous présenterons les différentes générations de cellules solaires, mettant en lumière l'intérêt spécifique des cellules solaires à couche mince qui sera décrite par la suite avec les différents matériaux. Le principe du logiciel utilisé sera décrit ; la modélisation permettra d'utiliser les caractéristiques électriques d'une cellule solaire dans la détermination des paramètres essentiels dans notre cellule.

Le deuxième chapitre de cette recherche se consacre à l'exploration des matériaux de transport d'électrons (ETMs) en tant qu'alternatives respectueuses de l'environnement pour résoudre les problèmes associés à la toxicité du sulfure de cadmium (CdS) généralement utilisé. Nous commencerons par la description de la structure étudiée avec les données utilisées. Une étude de simulation approfondie est entreprise pour évaluer différents matériaux pour la couche de transport d'électron ETL et identifier un élément ayant un bon rendement tout en étant non toxique, favorisant ainsi une approche écologique. Dans la deuxième partie de ce chapitre, une couche de contact arrière (BSF) sera ajoutée. Trois matériaux seront explorés afin d'optimiser le comportement des performances de la cellule solaire étudiée. Un BSF respectueux de l'environnement est choisi à cette étape pour renforcer l'efficacité du dispositif.

Suite à la sélection des couches ETL et BSF appropriées, le troisième chapitre se concentre sur l'amélioration du rendement de conversion énergétique de notre structure SLG/Mo/SnS/CIGS/SnS₂/AZO/Al. Cela est réalisé par la variation des paramètres des trois couches ; émettrice, absorbante et de contact arrière, à savoir le

dopage, l'énergie de gap et l'épaisseur. La discussion des résultats obtenus nous permettra de comprendre l'impact des caractéristiques de chaque couche avec les matériaux sélectionnés et de déterminer les valeurs optimales pour un meilleur fonctionnement de notre cellule.

Le quatrième chapitre propose une nouvelle approche en éliminant complètement le matériau absorbant CIGS (CuInGaSe_2). À la place, une couche absorbante à base de nanotubes de carbone SWCNTs est introduite pour surmonter la toxicité associée au gallium et à l'indium. Cette substitution vise à améliorer la durabilité et la compatibilité environnementale de la cellule solaire. L'effet des paramètres de cette couche nous permettra de comprendre les phénomènes régis par l'incorporation de cette couche organique.

Enfin, la conclusion synthétise les résultats obtenus tout en mettant en lumière les perspectives nécessaires pour améliorer ce travail.

I. Chapitre :

Introduction à la conversion d'énergie

I.1. Introduction

Au XXI^e siècle, la recherche d'une source d'énergie propre et fiable est devenue plus intense, avec une augmentation des investissements dans les énergies renouvelables par rapport aux combustibles fossiles. En 2023, une estimation mondiale prévoyait un investissement global d'environ 2 800 milliards de dollars dans le secteur énergétique. Parmi ces financements, plus de 1 700 milliards de dollars étaient dirigés spécifiquement vers les énergies propres, englobant les énergies renouvelables, le nucléaire, les infrastructures réseau, le stockage, les carburants à faibles émissions, les améliorations d'efficacité, ainsi que les énergies renouvelables et l'électrification à l'usage final. Les 1 000 milliards de dollars restants étaient attribués à l'approvisionnement en énergie et aux combustibles fossiles. Environ 15 % de cette somme était dédiée au charbon, tandis que le reste était investi dans le pétrole et le gaz [1]. Au cours des cinq dernières années, le rapport entre les investissements dans les combustibles fossiles et les énergies propres a évolué. En 2018, ce ratio était de 1 pour 1, équilibrant les deux catégories. Cependant, en 2023, ce rapport a considérablement changé pour atteindre 1 pour 1.7, démontrant une nette augmentation des investissements dans les énergies renouvelables [2]. Ce changement significatif témoigne de divers facteurs qui ont stimulé cette croissance. Il s'agit principalement d'une amélioration de l'économie à un moment où les prix des combustibles fossiles sont élevés et instables, ainsi que d'un soutien politique accru du gouvernement. L'une des principales raisons de la transition vers les énergies renouvelables est le problème de l'épuisement des ressources non renouvelables et de la couche d'ozone provoquée par une concentration atmosphérique excessive de CO₂. Par conséquent, pour une énergie efficace, fiable et inoffensive, l'humanité recherche des sources d'énergie alternatives comme le solaire, l'éolien, biomasse. La figure I.1 présente une comparaison entre les énergies renouvelables (énergie propre) et non renouvelables (combustibles fossiles) en fonction de l'investissement financier mondial, de la performance et de celle qui a probablement le meilleur potentiel futur.

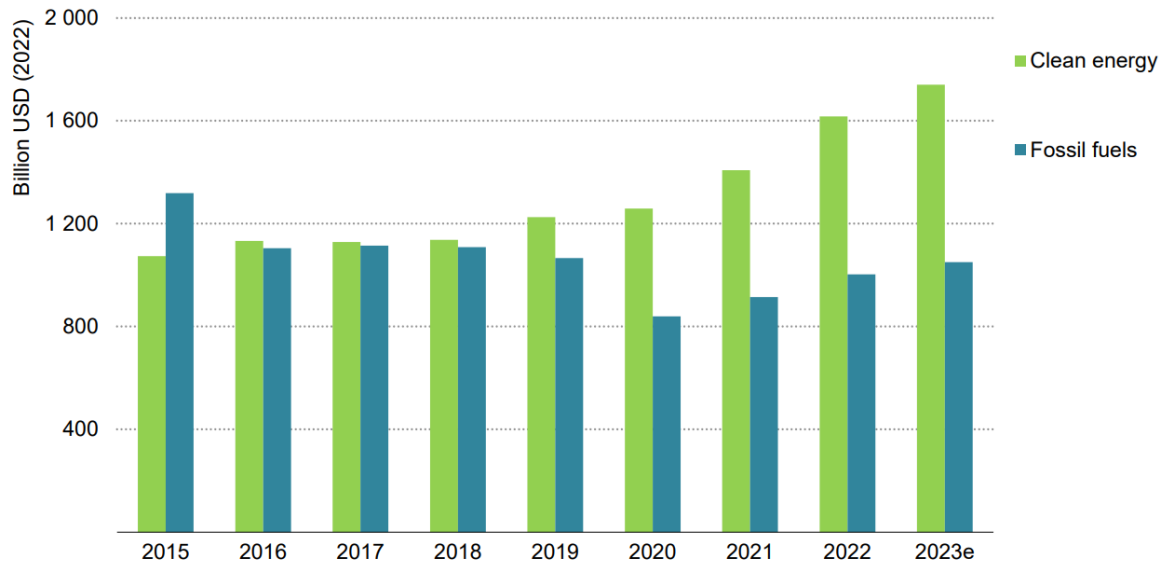


Figure I. 1: Investissement mondial dans les énergies renouvelables et non renouvelables (2015–2023) [2]

D'après les données présentées dans la figure I.1, une tendance notable émerge : en 2015, les investissements dans les énergies non renouvelables étaient prédominants. Cependant, au cours de la période 2016-2019, une légère augmentation des investissements dans les énergies renouvelables a été constatée. Au cours de la période s'étendant de 2020 à 2023, les investissements dans les énergies renouvelables ont représenté environ les deux tiers de celui consacré aux énergies non renouvelables.

En outre, la capacité des sources d'énergie renouvelables a augmenté annuellement de 2016 à ce jour, atteignant un sommet dépassant les 315 GW (Voir figure I.2). Cette croissance a été principalement attribuée à l'expansion des secteurs de l'énergie solaire photovoltaïque et de l'énergie éolienne. Toutefois, malgré ces avancées encourageantes, les tendances actuelles ne semblent pas être à la hauteur de l'objectif ambitieux de parvenir à zéro émission de gaz à effet de serre (GES) nette d'ici 2050, tel que défini par l'Agence internationale de l'énergie (AIE) et les scénarios du rapport "World Energy Transitions Outlook" de l'Agence internationale pour les énergies renouvelables (IRENA) [3]. Afin de répondre à cet impératif de réduction des émissions de GES, les projections énergétiques élaborées par ces organismes suggèrent que le monde devrait augmenter sa capacité d'énergie renouvelable de manière substantielle. Il serait nécessaire d'ajouter annuellement 825 GW d'énergie renouvelable jusqu'en 2050 [4].

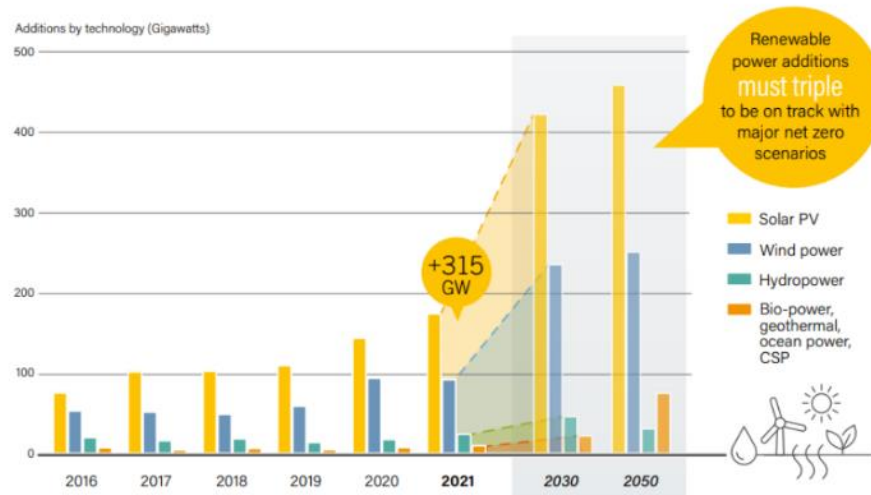


Figure I. 2 : Accroissement annuel de la capacité de production d'énergies renouvelables en vue d'atteindre les objectifs de zéro émission en 2030 et 2050. [3,4]

Dans ce chapitre, nous définirons chaque type de conversion d'énergie renouvelable, présenterons les différentes technologies liées ainsi que leurs avantages et inconvénients. Ensuite, nous nous concentrons sur la conversion photovoltaïque. Nous expliquons comment les cellules solaires fonctionnent, en commençant par l'absorption des photons et la transformation de cette énergie en charge électrique, suivie de la collecte de ces charges dans un circuit externe. Nous discutons également des processus de décalage de bande, de génération et de recombinaison. En outre, nous explorons les différentes générations de cellules solaires, mettant en évidence l'intérêt particulier des cellules solaires à couche mince CIGS. Une description du rôle des matériaux des différentes couches constituant ce type de cellule sera présentée. Pour conclure ce chapitre, nous aborderons le logiciel de simulation SCAPS-1D, choisi pour nos simulations.

I.2. Les énergies renouvelables et leurs processus de conversion

Les sources d'énergie non fossiles renouvelables sont appelées énergies renouvelables. Elles produisent de l'électricité, de la chaleur et des carburants. Les techniques de cogénération produisent à la fois de la chaleur et de l'électricité. Les principales sources d'énergies renouvelables sont illustrées sur la figure I.3

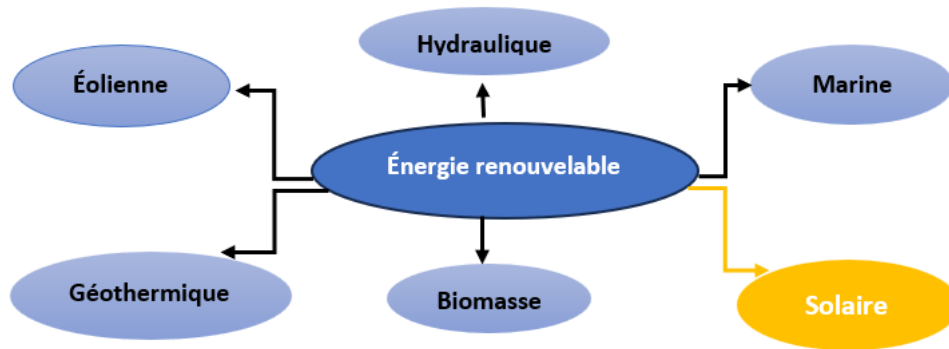


Figure I. 3: Différents énergies renouvelables

I.2.1. Energie éolienne

L'énergie éolienne, après l'énergie solaire, est le secteur enregistrant la croissance la plus rapide à l'échelle mondiale, comme le montre la figure I.4. En 2021, des installations éoliennes record ont été enregistrées, totalisant une capacité de 102 GW, propulsant la capacité mondiale totale à plus de 845 GW, dont 791 GW à terre et le reste en mer [3].

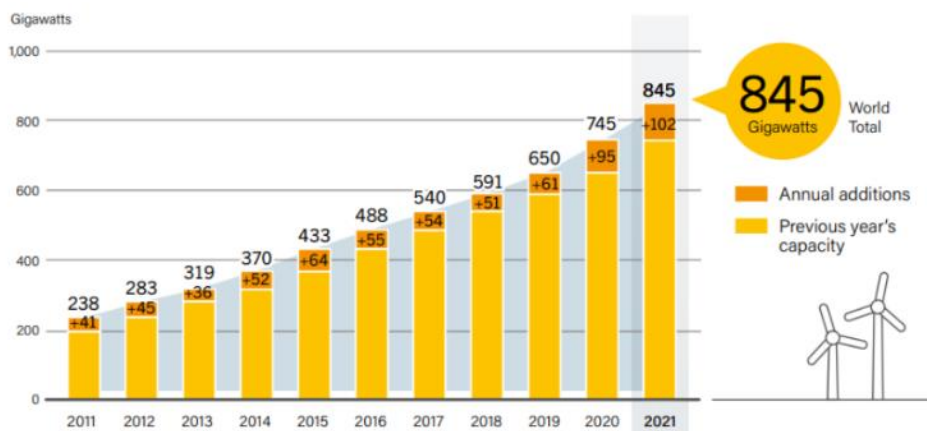


Figure I. 4: Augmentation annuelle de la capacité mondiale d'énergie éolienne, 2011-2021[3,4].

Le potentiel de cette source d'énergie provient de la force du vent, exploité à la fois par les parcs éoliens terrestres et offshore. Les éoliennes convertissent l'énergie cinétique du vent en énergie mécanique à travers des pales rotatives, transformée ensuite en électricité par un générateur électrique. Toutefois, les éoliennes requièrent une vitesse minimale du vent (environ 10-15 km/h) pour démarrer, et au-delà de 90 km/h, elles s'arrêtent par mesure de sécurité. L'éolien offshore tire parti de vents marins

plus constants, assurant une production d'électricité plus prévisible et plus importante, pouvant atteindre jusqu'à 50% de plus qu'à terre [5]. Bien que l'éolien offshore évite les oppositions locales aux parcs éoliens près des habitations, il fait face à des défis de maintenance en milieu marin et à des coûts de raccordement au réseau plus élevés. Malgré son potentiel, l'énergie éolienne présente des limites telles que des nuisances sonores pour certaines générations d'éoliennes et des impacts sur les écosystèmes locaux, affectant la faune et la flore. En général, une éolienne peut générer, sur une période de trois mois, une quantité d'énergie équivalente à celle requise pour sa production, son installation, son entretien et son démantèlement. Cette efficacité contribue à un amortissement rapide des coûts associés. De plus, cette source d'énergie présente l'avantage d'assurer une stabilité financière sur toute sa durée de vie, avec des coûts pratiquement constants au fil des 25 années d'exploitation [6].

I.2.2. Energie hydraulique

Historiquement, l'hydraulique est la première source d'énergie exploitée, remontant à l'apparition des norias en Asie Mineure, environ 200 ans avant notre ère [7]. L'hydroélectricité est le processus de conversion de l'énergie cinétique ou potentielle de l'eau en une forme d'énergie électrique en exploitant la force des cours d'eau. Elle réutilise l'eau dans un cycle presque continu, avec des pertes minimales intégrées au cycle global de l'eau. Deux types d'installations sont distingués : celles "au fil de l'eau", utilisant le débit continu d'un cours d'eau, et celles requérant des réserves d'eau, nécessitant des barrages, notamment les "grands barrages". Sur le plan des émissions de GES, l'hydroélectricité demeure la moins polluante parmi les sources de production d'électricité. Les émissions de gaz carbonique dans la fabrication du béton utilisé dans les centrales hydrauliques demeurent moindres comparativement aux centrales au gaz [8]. Cependant, malgré son caractère non polluant, l'hydroélectricité comporte des désavantages. Les investissements pour la construction de centrales sont significatifs, et ces installations peuvent impacter l'écosystème en amont et en aval des barrages. De plus, elles exposent aux risques de sécheresse et exigent des terrains adaptés.

I.2.3. Energie marine

Les mouvements gravitationnels de la lune et du soleil exercent une influence naturelle sur les marées, entraînant des flux et reflux côtiers. Cette dynamique naturelle

présente un potentiel significatif pour la production d'électricité à partir des énergies marines, faisant des océans la plus vaste réserve inexploitée d'énergie renouvelable. Bien que les technologies de production d'énergie des vagues représentent actuellement la part la moins importante du marché des énergies renouvelables, les déploiements réalisés en 2020 ont contribué à l'ajout d'environ 2 MW. Cela a porté la capacité installée opérationnelle totale à une estimation d'environ 527 MW à la fin de l'année [3,4]. Les énergies marines renouvelables (EMR) englobent une variété de technologies. Parmi les principales méthodes de conversion de l'énergie marine, on distingue [9,10] :

-L'énergie tirée des marées : Les usines marémotrices exploitent le flux et reflux pour générer de l'électricité en temps réel. En utilisant ce mouvement ascendant et descendant, des turbines sont activées, faisant tourner des alternateurs pour produire un courant électrique alternatif.

-L'énergie des courants marins : Cette forme d'énergie est captée grâce à des hydroliennes, semblables aux éoliennes pour l'énergie éolienne, mais utilisant la force des courants marins pour la production d'électricité.

-L'énergie thermique des mers : Cette technique exploite la différence de température entre les eaux de surface et les eaux profondes des océans afin de générer de l'électricité.

-L'énergie des vagues : Elle tire la partie de l'énergie cinétique contenue dans le mouvement ondulatoire des vagues pour la production d'énergie électrique.

- L'énergie osmotique : Cette méthode exploite le processus d'osmose entre l'eau douce et l'eau salée pour générer de l'électricité

I.2.4. Energie géothermique

La terre absorbe quotidiennement une quantité considérable d'énergie solaire, stockant cette énergie sous forme de chaleur dans son sol. En 1904, l'Italie a inauguré la première centrale géothermique au monde, marquant ainsi l'entrée officielle de l'énergie géothermique dans le domaine des énergies renouvelables [4]. Cette source d'énergie provient des profondeurs de la terre, offrant des possibilités de conversion en électricité ou en chaleur, avec diverses applications telles que le chauffage des bâtiments. Son utilisation peut être centralisée via des réseaux de chaleur ou individuelle à l'aide de pompes à chaleur enterrées, comme les sondes ou les aquifères.

Trois types de géothermie sont identifiés [11,12] : la géothermie profonde à haute énergie (températures de 150 à 250°C à 2 500 m de profondeur) pour la production d'électricité par le biais de vapeur et de turbines, la géothermie moyenne à basse énergie (de 30 à 150°C dans les aquifères) pour le chauffage urbain collectif par le biais de réseaux de chaleur, et la géothermie à très basse énergie (moins de 30°C, entre 10 et 100 m de profondeur) par le biais de pompes à chaleur.

Comparativement à d'autres sources d'énergie, la géothermie présente l'avantage notable de fournir une énergie de manière continue, sans nécessiter d'espace de stockage. Cependant, son développement est entravé par le besoin d'une expertise approfondie du sous-sol.

I.2.5. Energie issue de la biomasse

Historiquement, jusqu'au XVIIIe siècle, l'humanité dépendait principalement de la biomasse, notamment du bois, comme source d'énergie. Selon l'Agence internationale de l'énergie, la biomasse et les déchets représentent toujours 10 % de la production mondiale d'énergie primaire, dont 13.3 % proviennent des énergies renouvelables [13]. À l'échelle mondiale, la biomasse est une source d'énergie renouvelable largement exploitée. Sur le plan chimique, elle se caractérise comme un hydrocarbure principalement composé de carbone (C), d'hydrogène (H), d'oxygène (O), et d'azote (N) [14]. Les proportions de ces éléments diffèrent selon la nature, l'origine, l'âge et les conditions de croissance de la biomasse étudiée, telles que le type de sol, son humidité et l'ensoleillement. La matière organique, composée de substances d'origine végétale et animale, Notre intérêt se porte sur la matière organique d'origine végétale, compte tenu du vaste potentiel agricole de notre pays, l'Algérie. En effet, les terres agricoles couvrent environ 20 % de la superficie totale du pays, soit près de 40 millions d'hectares, comprenant 8.5 millions d'hectares de terres cultivées et 31.5 millions d'hectares de parcours [15]. Dans des régions comme le Sahara, la production annuelle de biomasse se révèle significative, dépassant les 20 millions de tonnes par an provenant du palmier dattier. Dans d'autres régions, nous avons estimé l'apport annuel de 165 600 tonnes de grignons d'olive, 60 000 tonnes d'alfa, 4 395 000 tonnes de céréales et 25 720 tonnes de paille de maïs.

Ces ressources sont précieuses pour la conversion d'énergie et peuvent être produites sous forme de chaleur, d'électricité et de force mécanique. Cependant, les

résultats obtenus dépendent du type de biomasse et des méthodes d'exploitation utilisées. Trois approches principales sont couramment utilisées [16-18] : la voie sèche, la voie humide et la production de biocarburants.

La voie sèche, représentée principalement par la filière thermochimique, englobe diverses technologies telles que la combustion, la gazéification et la pyrolyse. La combustion produit de la chaleur par l'oxydation totale du combustible, générant de l'électricité et de la chaleur pour des applications industrielles. La gazéification convertit la biomasse solide en gaz combustible, utilisé ensuite pour produire de l'énergie mécanique ou de l'électricité. La pyrolyse, quant à elle, décompose la matière carbonée sous l'effet de la chaleur, formant du charbon de bois, une huile pyrolytique et un gaz combustible.

La voie humide, dominée par la méthanisation, repose sur la décomposition de la matière organique par des micro-organismes dans un digesteur anaérobie, opérant dans un digesteur chauffé en l'absence d'oxygène, favorisant ainsi une réaction en milieu anaérobie. Ce processus génère principalement deux produits : le biogaz et le digestat, ce dernier représentant un résidu de matière organique non biodégradable.

Les biocarburants résultent de réactions spécifiques qui génèrent des carburants liquides ou gazeux. Par exemple, le biodiesel est le produit de l'interaction entre l'huile, comme celle de colza ou de tournesol, et l'alcool. D'un autre côté, le bioéthanol émerge d'un mélange de sucre fermenté et d'essence. Ces biocarburants peuvent être classés en trois générations distinctes :

-Première génération : Produite à partir de graines.

-Deuxième génération : Dérivée de résidus non alimentaires de cultures, tels que la paille, les tiges et le bois, offrant ainsi une voie prometteuse pour la production d'énergie renouvelable. Un exemple concret de cette approche est observé en Algérie, où la paille de maïs représente une ressource considérable, avec une production annuelle de 25 720 tonnes. Après la conversion de cette biomasse ligneuse, des résultats significatifs sont obtenus. Par exemple, il est envisageable de produire annuellement 5 504,08 tonnes d'éthanol propre et 565,84 tonnes de biodiesel. Ces résultats ont été présentés au niveau international lors d'une communication portant sur "Potentiel de la paille de maïs pour la production d'éthanol et de biodiesel".

-Troisième génération : Créée soit à partir d'hydrogène produit par des microorganismes, soit à partir d'huile produite par des microalgues.

La biomasse se distingue des énergies renouvelables telles que l'éolien et le photovoltaïque par sa fiabilité constante. Contrairement à ces dernières, dépendantes des conditions météorologiques, la biomasse offre une solution stable, capable de compenser les fluctuations d'autres sources d'énergie [19]. Elle répond ainsi aux besoins énergétiques, même en période de rendement faible. Malgré ses avantages, tels que le stockage pour les pics de demande, un coût compétitif et une stabilité de prix, la biomasse présente des défis à surmonter. Un rendement énergétique relativement bas et l'utilisation de terres arables risquant de réduire la production agricole sont des points à considérer. Il est crucial d'éviter une surutilisation, notamment dans le cas du bois-énergie, pour prévenir la déforestation majeure et atténuer les risques environnementaux associés.

I.2.6. Energie solaire

L'énergie solaire est une source adaptable, propre et non polluante. Cette forme d'énergie se distingue de l'énergie éolienne par l'absence totale de bruit. La figure I.5 montre également la croissance remarquable de l'énergie solaire photovoltaïque (PV), qui a atteint en 2021 un nouveau sommet avec de nouvelles installations estimées à 175 GW. Cela a propulsé la capacité totale mondiale à environ 942 GW, englobant à la fois les capacités en réseau et hors réseau [3,4]. L'énergie solaire tire parti du rayonnement solaire, convertissant celui-ci en électricité ou en chaleur à travers trois technologies distinctes [20-22]: la thermique, la thermodynamique et le photovoltaïque.

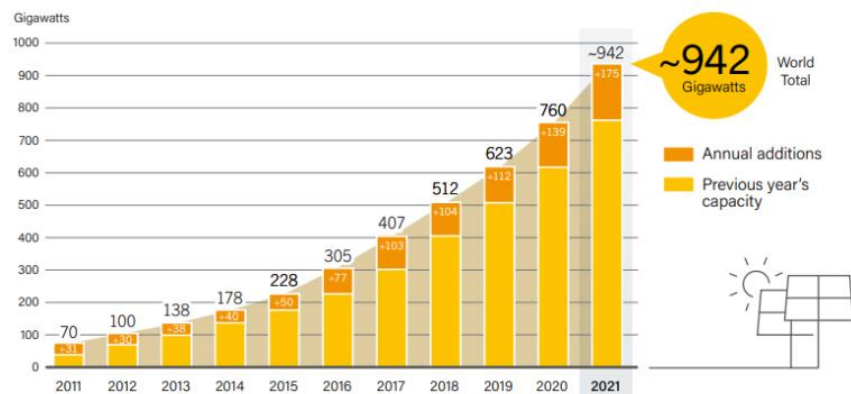


Figure I. 5: Évolution annuelle de la capacité solaire photovoltaïque mondiale, 2011-2021, [3,4]

La technologie solaire thermique exploite le rayonnement solaire pour produire de la chaleur destinée directement au chauffage résidentiel et à la production d'eau chaude sanitaire au moyen de capteurs solaires. De plus, les coûts de maintenance et d'exploitation de ces systèmes restent relativement bas.

La technologie solaire thermodynamique produit de la chaleur à partir du rayonnement solaire capté, convertissant ensuite cette chaleur en électricité pour l'intégrer aux réseaux électriques. Son rendement dépend de l'ensoleillement direct et elle offre la possibilité de stocker une partie de l'électricité générée.

La technologie photovoltaïque transforme le rayonnement solaire en électricité à l'aide de modules photovoltaïques, permettant soit l'intégration dans les réseaux électriques, soit une utilisation locale. Elle présente plusieurs avantages, notamment une durée de vie des panneaux solaire pouvant atteindre 20 ans et une capacité de surproduction d'électricité commercialisable. Notre recherche se concentre spécifiquement sur la cellule solaire photovoltaïque, que nous examinerons en détail par la suite dans notre thèse. Cette orientation est motivée par la volonté de comprendre en profondeur les aspects spécifiques de cette technologie en vue d'améliorer son rendement et son intégration dans les systèmes énergétiques.

I.3. Conversion photovoltaïque de l'énergie solaire : Principe d'une cellule solaire

Le principe essentiel d'une cellule solaire repose sur la coordination de trois mécanismes clés qui interagissent pour transformer l'énergie solaire en énergie électrique de manière quasi-instantanée. Ces processus incluent tout d'abord l'absorption des photons par le matériau constitutif du dispositif, puis la conversion de l'énergie photonique en énergie électrique, et enfin la collecte des particules générées vers un circuit externe. La représentation schématique illustrant sur la figure I.6 offre une synthèse claire du mécanisme d'une cellule solaire présentant les étapes de principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque.

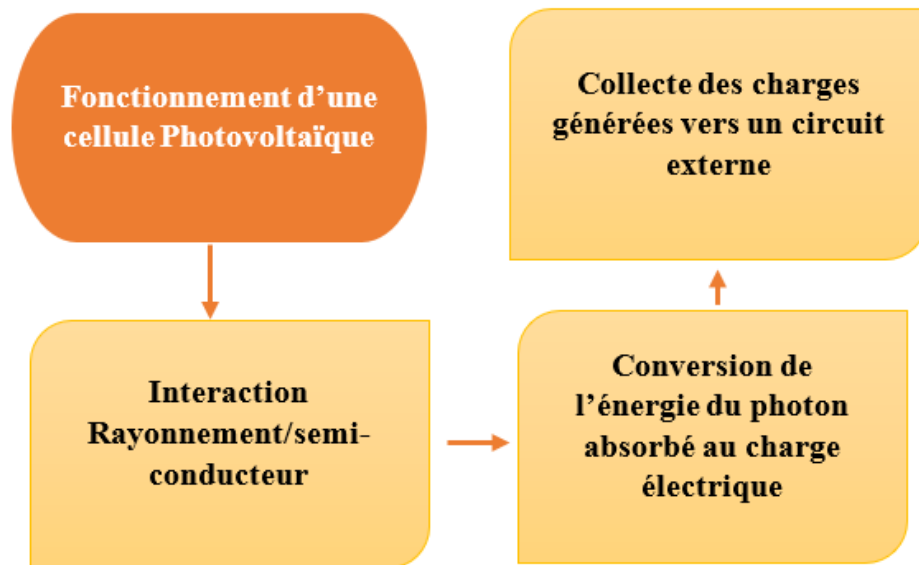


Figure I. 6 : Etapes de principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque

I.3.1. Interaction Rayonnement/semi-conducteur (Absorption de la lumière)

Le processus initial de la conversion photovoltaïque commence par l'absorption de la lumière, un phénomène crucial. La lumière est constituée de photons, chacun portant une énergie liée à sa longueur d'onde spécifique. Lorsque la lumière comprend différentes couleurs, elle englobe ainsi une gamme de longueurs d'onde variées. En conséquence, une partie de ce spectre peut traverser certaines substances et même les traverser complètement. En général, lorsqu'un rayonnement lumineux atteint un matériau, trois événements optiques principaux peuvent se produire [23], comme illustré sur la figure I.7 :

- La réflexion, qui dépend de l'indice de réfraction (n) des matériaux traversés ; ce phénomène renvoie la lumière à partir de la surface du matériau. L'indice de réfraction est lui-même fonction de la longueur d'onde du rayonnement et des propriétés du milieu
- La transmission, où la lumière traverse le matériau sans interaction car son énergie est trop faible ; ce type de photons rend le matériau transparent à leur passage
- L'absorption, où la lumière pénètre dans le matériau et y reste capturée, transformant son énergie en une autre forme, sous forme électrique ou thermique.

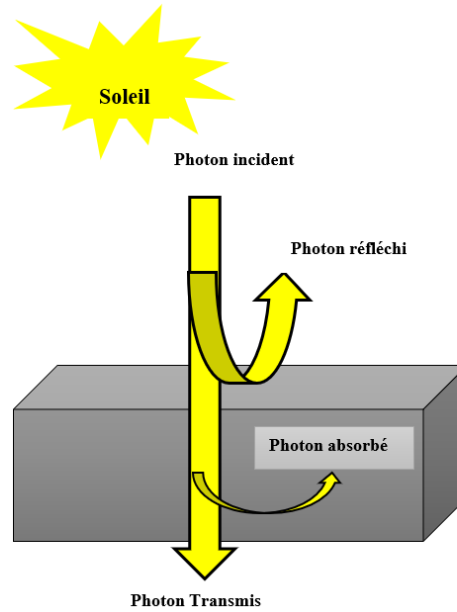


Figure I. 7 : Trois phénomènes associés au photon incident : réflexion, transmission et absorption

Notre attention se porte spécifiquement sur le phénomène d'absorption car il est responsable de la conversion d'une portion du flux lumineux en électricité. Pour optimiser cette conversion, le matériau utilisé doit présenter un coefficient d'absorption (α) élevé tout en minimisant son coefficient de réflexion (r). Lorsqu'un faisceau lumineux incident (I_0) traverse un matériau solide d'une certaine épaisseur (d), il engendre un faisceau transmis conformément à la loi de Beer-Lambert, exprimée par l'équation I.1. La transmittance et l'absorbance de ce faisceau sont définies par l'équation I.2 et l'équation 1.3. L'intensité d'un rayonnement lumineux diminue lorsqu'il traverse un matériau absorbant. La densité optique, représentée par l'expression (I.4), mesure cette diminution de l'intensité lumineuse, et elle dépend essentiellement du coefficient d'absorption et de l'épaisseur de matériau [23,24]

$$I = I_0 \times e^{(-\alpha.d)} \quad (\text{I.1})$$

$$T = \frac{I}{I_0} \times e^{(-\alpha.d)} \quad (\text{I.2})$$

$$A = -\log_{10} \left(\frac{I}{I_0} \right) - \log_{10}(T) \quad (\text{I.3})$$

$$DO = -\log_{10} \left(\frac{I}{I_0} \right) = 0.43 \alpha . I \quad (\text{I.4})$$

L'absorption de la lumière par un matériau est fortement influencée par une caractéristique clé : son gap, également appelée « bande interdite ». Ce dernier

représente la différence d'énergie entre le sommet de la bande de valence, occupée par des électrons, et le fond de la bande de conduction, vide. Il existe deux formes de gap : direct et indirect, chacune ayant un impact distinct sur les propriétés d'absorption optique. Selon la nature de gap, la figure I.8(a,b) montre les différentes transitions possibles.

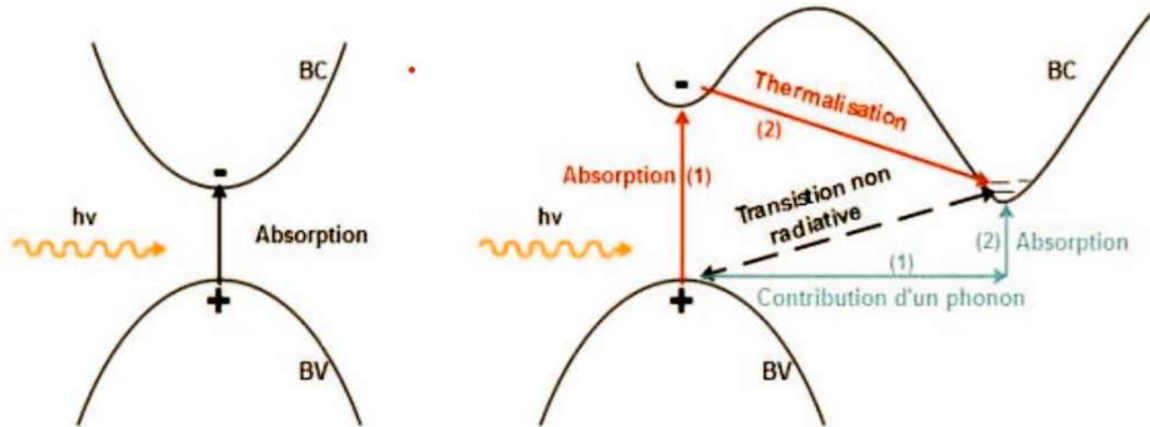


Figure I. 8: Deux schématisation du gap énergétique (a) direct (a) et (b) indirect.[25]

- Le gap direct : Lorsque le point le plus bas de la bande de conduction (Electrons) et le point le plus élevé de la bande de valence (Trous) se trouvent au même niveau de vecteur d'onde (k), on parle de gap direct. Dans ce cas, les transitions des électrons entre ces bandes se font de manière verticale, ce qui rend ces transitions radiatives. Par exemple, les matériaux semi-conducteurs comme CIGS présentent un gap direct [26], un semi-conducteur de type P que nous allons étudier en détail dans les deux chapitres suivants.

- Le gap indirect : À l'inverse du gap direct, le gap indirect montre une transition oblique entre les extrémités des bandes, plutôt que verticale, comme indiqué dans la figure 1.8(b). Ces transitions électroniques sont non radiatives car elles impliquent une modification du vecteur d'onde. Dans ce cas l'intervention d'une troisième caractéristique est essentielle. Cette caractéristique est liée aux vibrations du réseau cristallin et est appelée « phonon » d'énergie Ω . Même si un photon de plus grande énergie peut directement exciter un électron vers un minimum relatif de la bande de conduction, ce dernier se thermalise dans le minimum absolu de la bande de conduction. Cette condition supplémentaire pour l'absorption réduit considérablement les probabilités d'absorption de la lumière. Les matériaux tels que le silicium et le germanium présentent cette structure de bande indirecte.

I.3.2. Transfer de l'énergie du photon aux charges électriques

Dans un matériau, les photons absorbés transfèrent leur énergie aux électrons périphériques, ceux situés le plus loin du noyau. Ce transfert d'énergie arrache littéralement ces électrons de leur orbite atomique. Sous l'influence de l'énergie photonique, ces électrons peuvent être libérés de l'attraction atomique, à condition que l'énergie du photon dépasse la valeur du gap énergétique du matériau [23]. Ce gap représente l'énergie minimale nécessaire pour effectuer la transition d'un électron de la bande de valence à la bande de conduction. Lorsque cette condition est satisfaite, la libération d'électrons crée un électron libre, laissant derrière lui un "trou" dans la bande de valence. Un trou, dans ce contexte, correspond à l'absence d'un électron dans une bande initialement pleine. Ce comportement est assimilé à celui d'une charge positive dans une bande entièrement occupée de charge négative. La circulation des électrons dans une direction et des trous dans l'autre génère un courant électrique, particulièrement lorsque le matériau est connecté à une source de charge. Ce phénomène est couramment exploité dans les semi-conducteurs, où la largeur du gap énergétique permet la génération de paires électron-trou. En revanche, dans les isolants, le gap est généralement trop important, rendant difficile la création de telles paires. Pour les conducteurs, une densité élevée d'électrons libres est déjà présente. La figure I.9 schématise les diagrammes de bandes d'isolants, de semi-conducteurs et de conducteurs.

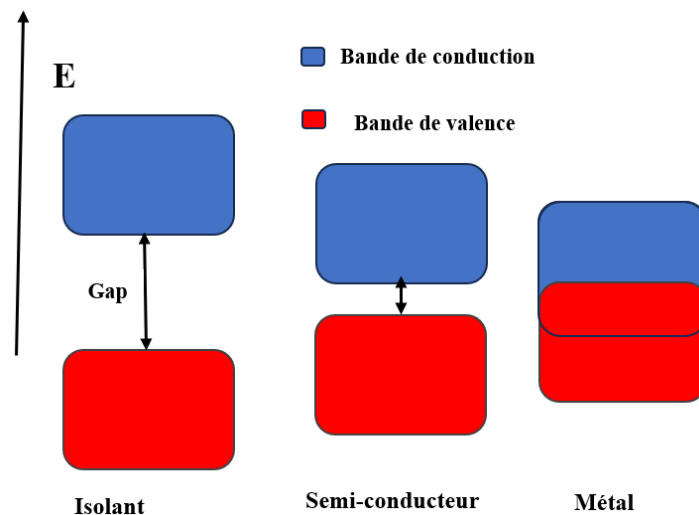


Figure I. 9 : Schématisation des bandes énergétiques d'un isolant, d'un semi-conducteur et d'un Métal

La figure ci-dessus illustre clairement que l'énergie du photon doit être au moins égale à celle du gap E_g , spécifique au matériau, pour déplacer un électron de la bande de valence à la bande de conduction et induire la formation d'une paire électron-trou. (Voir figure I.10)

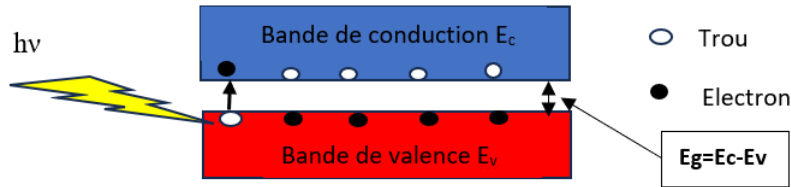


Figure I. 10: Processus de formation d'une paire électron-trou

Un photon avec une fréquence ν et une énergie $h\nu$, décrite par l'équation I.5[27], est capable, au moins égale à l'énergie E_g , de transférer cette énergie à un électron de la bande de valence vers la bande de conduction.

$$h\nu = h \frac{c}{\lambda} \geq E_g \quad (\text{I.5})$$

Ici, h représente la constante de Planck, c est la vitesse de la lumière, λ est la longueur d'onde du photon et E_g est l'énergie de bande interdite du matériau. L'équation I.5 montre que pour qu'une transition électronique puisse se produire, l'énergie des photons incidents ($h\nu$) doit être égale ou supérieure à l'énergie de la bande interdite (E_g). Les photons avec une énergie inférieure à E_g ne possèdent pas la capacité d'exciter les électrons, rendant la transition impossible et empêchant l'absorption du photon.

La longueur d'onde maximale qui peut contribuer à la formation de porteurs de charge est déterminée par l'équation (I.6) [27] :

$$\lambda \leq \frac{hc}{E_g} = \frac{1.24}{E_g} \quad (\text{I.6})$$

Ce seuil dépend du matériau utilisé, car chaque matériau possède une structure électronique distincte due à la configuration atomique unique. Par conséquent, les énergies impliquées dans les transitions électroniques varient également.

I.3.3. Collecte des charges électriques :

a) Champ électrique :

La simple formation de paires électron-trou n'est pas suffisante, car elles ont tendance à se recombiner naturellement, générant principalement de l'énergie thermique. Pour permettre une collecte des charges, une circulation continue sans recombinaison, il est impératif de séparer ces charges.

L'une des approches consiste à générer un champ électrique au sein du matériau en dopant sélectivement des parties d'un semi-conducteur (SC) avec des atomes présentant un électron de valence supplémentaire ou un électron de valence de moins par rapport à l'atome du semi-conducteur [28]. Dans la première partie dopée, il en résulte un surplus de charges négatives, la rendant ainsi donneuse d'électrons et qualifiée de dopage de type n. En revanche, la seconde partie dopée, avec un excédent de charges positives, devient accepteur d'électrons et est désignée comme dopage de type p.

Lorsque deux semi-conducteurs dopés différemment entrent en contact, elles forment une jonction PN. Cela est obtenu soit par le contact de deux matériaux semi-conducteurs identiques avec les mêmes gaps énergétiques, ce qui est connu sous le nom d'homojonction, soit par l'hétérojonction, qui consiste à mettre en contact deux matériaux semi-conducteurs différents avec des gaps énergétiques différents. En termes de mécanisme opérationnel, l'homojonction présente des similarités avec l'hétérojonction. En effet, le déplacement des charges négatives excédentaires présentes dans le matériau SC dopé de type n, qui tendent à se combiner avec les charges positives du matériau SC dopé de type p, et inversement pour les charges positives excédentaires du matériau SC de type p. Ce déplacement génère deux zones distinctes, comme présenté sur la figure I.11.

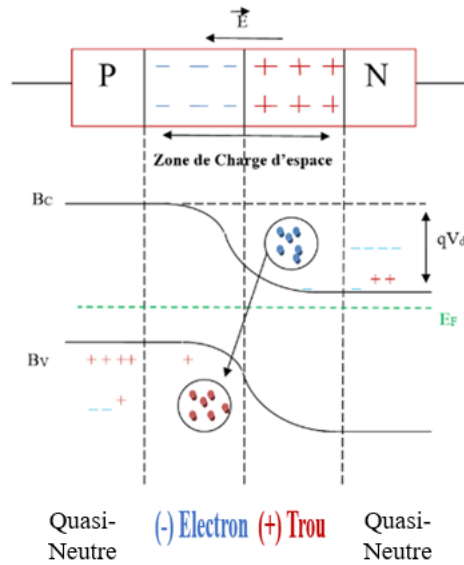


Figure I. 11 : Diagramme de bande et principe d'une jonction PN (cas d'une homo-jonction)

Une région chargée positivement du côté du semi-conducteur N (indiquée en rouge) et une région chargée négativement du côté du semi-conducteur P (indiquée en bleu). Cette région de transition est couramment désignée sous le nom de Zone de Charge d'Espce (ou zone de déplétion). Lorsque cette zone de déplétion se forme, elle engendre un champ électrique dirigé du coté N vers P avec une barrière de potentiel qV_d à l'intérieur.

Lorsque la cellule est exposée aux soleils, la partie N de la cellule est recouverte par une grille métallique (contact avant), qui agit comme une cathode, et une plaquette métallique (contact arrière) couvre la face opposée de la zone P de la cellule et agit comme une anode .En effet, lorsqu'une lumière génère des paires d'électrons-trous dans la zone de charge d'espace (ZCE), celles-ci se séparent instantanément sous l'influence du champ électrique interne, comme illustré sur la figure I.12.

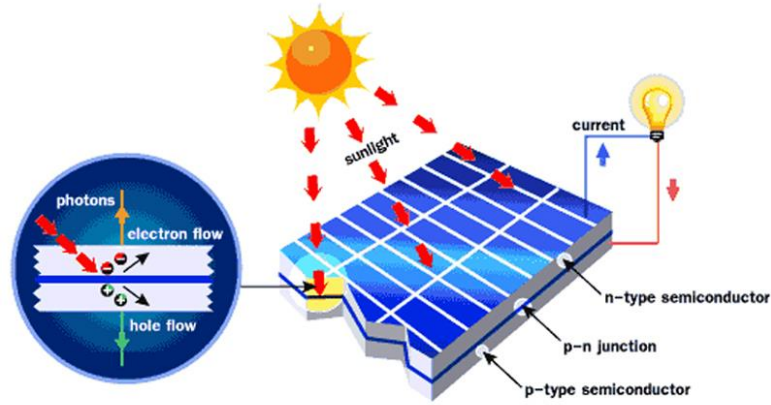


Figure I. 12: Schéma du principe d'une cellule solaire [29]

Une fois que les paires d'électrons-trous se sont dissociées, les charges libres doivent diffuser jusqu'aux électrodes pour être collectées. La mobilité des porteurs de charges définit la capacité de ces électrons ou trous à se déplacer à l'intérieur d'un matériau. Cette mobilité est exprimée en $\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{S}^{-1}$. La formule générale s'exprime à travers la relation suivante [30] :

$$\mu = \left| \frac{q \cdot t_c}{2m} \right| \quad (\text{I.7})$$

Le paramètre t_c représente la période entre deux collisions du porteur de charge (électron ou trou) avec les atomes constitutifs du cristal ou des impuretés et m désigne la masse effective du porteur de charge.

Les trous, porteurs de charges positives, sont précipités vers la zone P tandis que les électrons, porteurs de charges négatives, se dirigent vers la zone N. Ainsi, les trous et les électrons deviennent majoritaires, formant ce que l'on nomme le photo-courant de génération. Parallèlement, les porteurs minoritaires – tels que les trous créés du côté N et les électrons créés du côté P – établissent un gradient de concentration et se diffusent dans le matériau (Diffusion force on electrons /Diffusion force on holes). S'ils parviennent à atteindre la ZCE sans se recombiner, le champ électrique les guide à travers la zone de déplétion pour rejoindre la région où ils deviennent majoritaires ((E-field force on electrons /E-field force on holes) [29,31]. Ce processus représente le photo-courant de diffusion (Voir figure I.13).

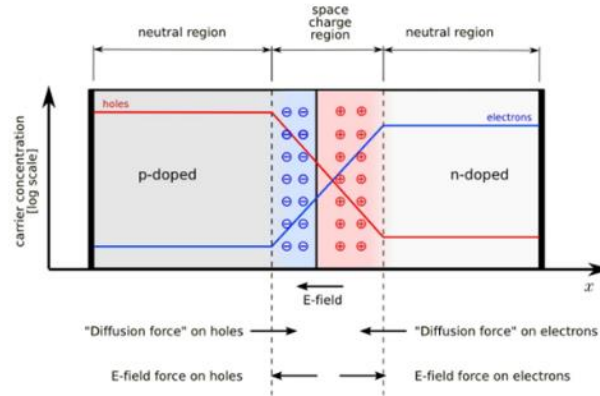


Figure I. 13: Création de la ZCE par la diffusion e^- et h^+ au niveau de la jonction PN [31]

En termes de performances, les hétérojonctions surpassent les homojonctions [32], offrant : Des améliorations comprennent une meilleure réponse spectrale et une utilisation optimale du spectre solaire, une augmentation de l'absorption des photons lorsque le premier semi-conducteur est épais, ainsi qu'une tension en circuit ouvert significativement élevée. Malgré ces avantages, il convient de noter que les hétérojonctions entraînent des pertes énergétiques en raison de la discontinuité entre deux matériaux semi-conducteurs. Ces pertes peuvent avoir un impact sur le transport des porteurs de charge. Ainsi, le choix judicieux du matériau revêt une importance cruciale dans ce contexte

b) Bande d'énergie d'une hétérojonction :

Le principal défi dans le domaine de la théorie des hétérojonctions réside dans la détermination de la barrière de potentiel existant aux différentes interfaces. Cette barrière conditionne le passage d'un électron ou d'un trou d'un matériau à l'autre. Dans la plupart des cas, les discontinuités des bandes peuvent être spécifiées dans l'une des expressions de discontinuité pour la bande de conduction ou la bande de valence. Plusieurs modèles ont été développés pour étudier les hétérojonctions [33] :

- Le modèle d'Anderson [34], qui ne prend pas en compte les états d'interface.
- Des modèles qui intègrent des états d'interface chargés et des dipôles, affectant ainsi la structure des bandes et conduisant à des processus de recombinaison.
- Des modèles qui considèrent à la fois l'influence des états d'interface et le transport par effet tunnel.

Parmi ces modèles, la règle d'affinité électronique ou le modèle d'Anderson est largement adopté par la majorité des chercheurs scientifiques pour calculer cette discontinuité.

Les règles de raccord d'Anderson, énoncées en 1962, se fondent sur la continuité du niveau de Fermi à la frontière entre ces deux matériaux A et B. Le raisonnement est illustré de manière explicite sur la figure I.14 (a, b) : la figure I.14 (a) représente la situation où les deux matériaux sont infiniment rapprochés mais non en contact, tandis que la figure I.14(b) représente la situation où les deux matériaux sont en contact.

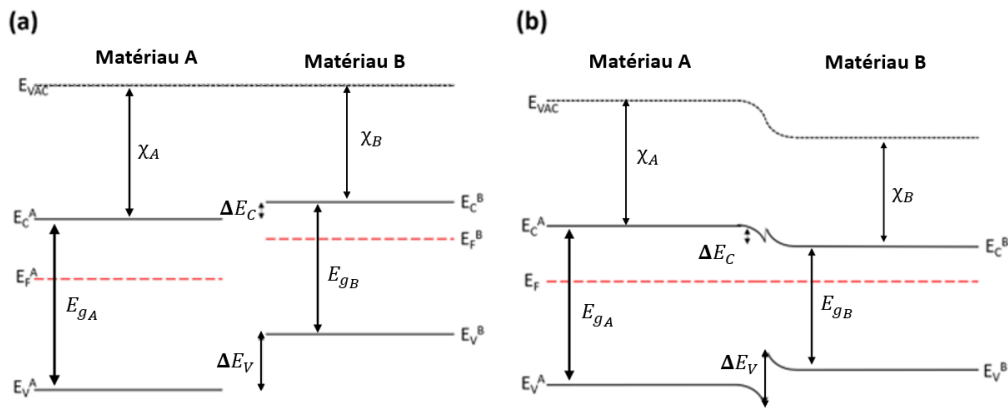


Figure I. 14: Diagramme schématique de la façon dont les alignements de bandes sont prédits à l'aide de la règle d'Anderson avec (a) Alignements naturels référencés au niveau de vide et (b) Alignement des bandes après avoir aligné les niveaux de Fermi.

Le diagramme de bande présent sur la figure I.14(b) indique une horizontalité du niveau de Fermi, impliquant la création de charges d'espace par migration ou accumulation de porteurs, ce qui provoque des discontinuités au niveau des bandes de conduction et de valence à l'interface d'une hétérojonction. Il est également essentiel de souligner que le modèle d'Anderson ne prend pas en considération les états d'interface et est basé sur l'hypothèse que le courant se transporte soit par injection dans les régions quasi-neutres, soit par recombinaison/génération dans la zone de charge d'espace (ZCE) [35].

Les différences entre E_{gA} , E_{gB} et les affinités électroniques χ_A , χ_B créent des discontinuités dans le raccordement des bandes de conduction et de valence, exprimées respectivement par ΔE_C et ΔE_V ou par CBO (Offset de Bande Conduction) et VBO (Offset de Bande de Valence) et peuvent être calculés selon l'équation suivante [36] :

$$CBO = \Delta E_C = \chi_A - \chi_B \quad (1.8)$$

$$VBO = \Delta E_V = CBO + (E_{gA} - E_{gB}) \quad (1.9)$$

Les critères cruciaux pour la sélection des matériaux dans la formation d'une hétérojonction sont les suivants [33] :

- Éviter la présence de pics, appelés « spikes », aux points de jonction des bandes de conduction ou de valence, susceptibles d'influencer le transport de charge. Pour un absorbeur de type P, cette condition est satisfaite lorsque $\Delta E_C < 0$ et $\Delta E_V > 0$
- Chercher des valeurs de ΔE_C ou ΔE_V aussi proches que possible de zéro afin d'obtenir une tension de diffusion (V_d) maximale.

I.3.4. Génération-Recombinaison

La génération de porteurs dans un semi-conducteur est le processus par lequel des porteurs sont créés, mesuré par un paramètre (G) qui indique le nombre de porteurs générés par unité de volume et par unité de temps ($\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$). Ce phénomène peut résulter de l'agitation thermique ou de l'excitation du semi-conducteur par une source externe telle que la lumière solaire. En revanche, la recombinaison représente le processus inverse de la génération et est définie par un paramètre spécifique au matériau (R), exprimé en $\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$. Certaines recombinaisons persistent malgré la présence d'un champ électrique généré par la jonction PN au sein de la cellule. Pour évaluer ces recombinaisons, influencées par la qualité du matériau, la longueur de diffusion des porteurs de charge (L_d) est utilisée par l'équation I.10[23]. Cette mesure représente la distance moyenne que les porteurs parcourent avant de se recombiner. Elle est principalement déterminée par la qualité du matériau utilisé et la mobilité (μ) du porteur concerné.

$$L_d = \sqrt{\tau \cdot D_{n,p}} = \sqrt{\mu_{n,p} \cdot \tau \cdot \frac{k \cdot T}{q}} \quad (I.10)$$

En utilisant les symboles suivants pour représenter les paramètres spécifiques : L_d : Longueur de diffusion des porteurs (en centimètres, cm) , $D_{n,p}$: Coefficient de diffusion des porteurs, qu'ils soient électrons ou trous (en centimètres carrés par seconde, $\text{cm}^2 \text{ s}^{-1}$) , k : Constante de Boltzmann (en joules par kelvin, J K^{-1}) , T : Température (en kelvins, K) , q : Charge élémentaire (en coulombs, C) , $\mu_{n,p}$: Mobilité des porteurs, qu'ils soient électrons ou trous (en centimètres carrés par volt seconde,

$\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$), τ : Durée de vie des porteurs, qu'ils soient électrons ou trous, dans le matériau (en secondes, s).

- **Différents types de recombinaison :**

À des températures autres que 0 K, des électrons sont présents dans la bande de conduction tandis qu'un nombre de trous occupent la bande de valence. Dans ce contexte, un électron libre peut libérer de l'énergie (cessant ainsi d'être un électron libre capable de se déplacer dans le cristal) et occuper une position vacante dans la bande de valence (précédemment occupée par un trou). Ce processus est appelé recombinaison électron-trou et peut se produire de deux manières distinctes : directement, par la rencontre des deux particules (comme la recombinaison radiative et la recombinaison Auger), ou indirectement, via l'intermédiaire d'un centre agissant comme un agent de liaison. Ce dernier processus est connu sous le nom de recombinaison assistée par les centres de recombinaison dans la bande interdite, également appelée recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH). La figure I.14 présente une illustration de ces divers mécanismes à l'intérieur d'un semi-conducteur [37,38]

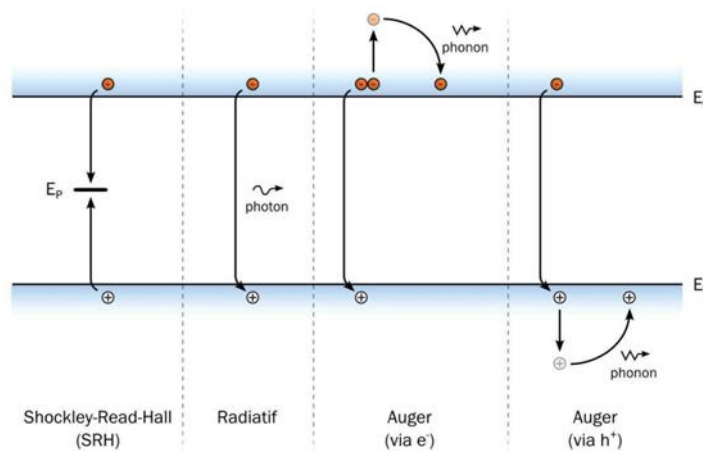


Figure I. 15: Mécanismes principales de recombinaison (radiatives et Auger et Shockley-Read-Hall (SRH)) [37,38]

-Recombinaisons radiatives : La recombinaison radiative (interbandes) est le phénomène inverse de la photogénération et se produit lorsqu'un électron de la bande de conduction se recombinaison avec un trou dans la bande de valence émet un photon. Ce photon possède une énergie correspondant au gap de la bande interdite du matériau, représentant ainsi le mécanisme contraire à l'absorption optique

-Recombinaisons Auger : La recombinaison Auger est une interaction impliquant trois particules. Lorsqu'un électron retombe dans la bande de valence, son énergie est transférée sous forme d'énergie cinétique à un autre électron libre ou à un trou situé dans un niveau profond de la bande de valence. Cette interaction nécessite donc la présence d'au moins un trou et un électron, la troisième particule pouvant être soit un trou, soit un électron. Bien que similaire à la recombinaison de bande à bande, la particularité de la recombinaison Auger réside dans le fait que la troisième particule reçoit l'énergie issue de la recombinaison

-Recombinaisons Shockley-Read-Hall : La présence de défauts volumiques tels que les atomes dopants ou les impuretés métalliques joue un rôle significatif dans le processus de recombinaison. Lorsqu'un défaut capture un électron et présente une probabilité plus élevée de capturer un trou plutôt que de réémettre l'électron vers la bande de conduction, il capture effectivement le trou, induisant ainsi la recombinaison de la paire électron-trou. Ces défauts sont désignés sous le nom de centres de recombinaison

I.4. Évolution des différentes générations de cellules solaires.

Actuellement, les cellules solaires sont classées en quatre familles principales (générations) [39] en fonction du temps et des catégories de matériaux utilisés pour les fabriquer. La figure I.16 résume les différents types de générations de cellules solaires, tandis que la figure I.17 présente des rendements de conversion les plus élevés confirmés pour les cellules de recherche dans une gamme de technologies photovoltaïques, tracés de 1976 à nos jours.

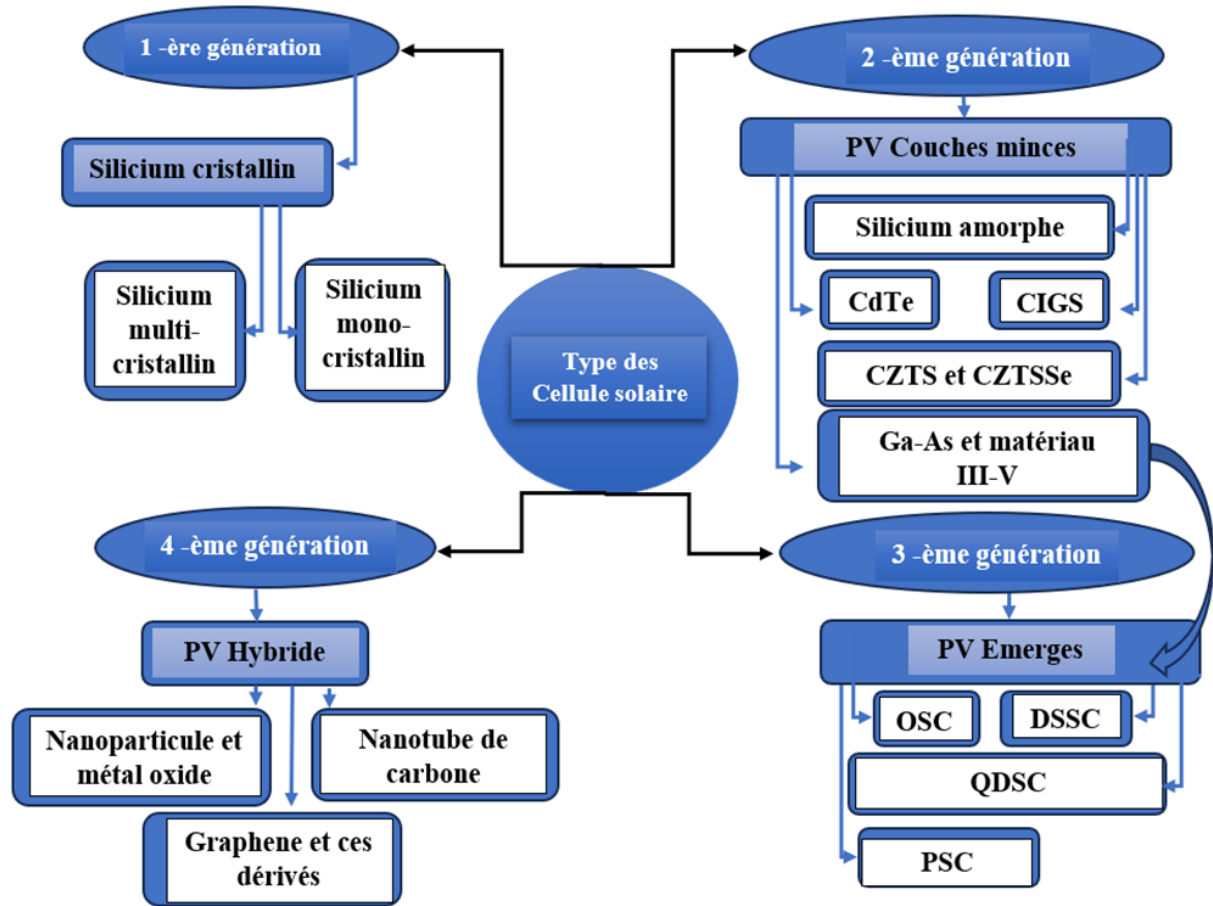


Figure I. 16 : Représentation de différentes familles de cellules solaires

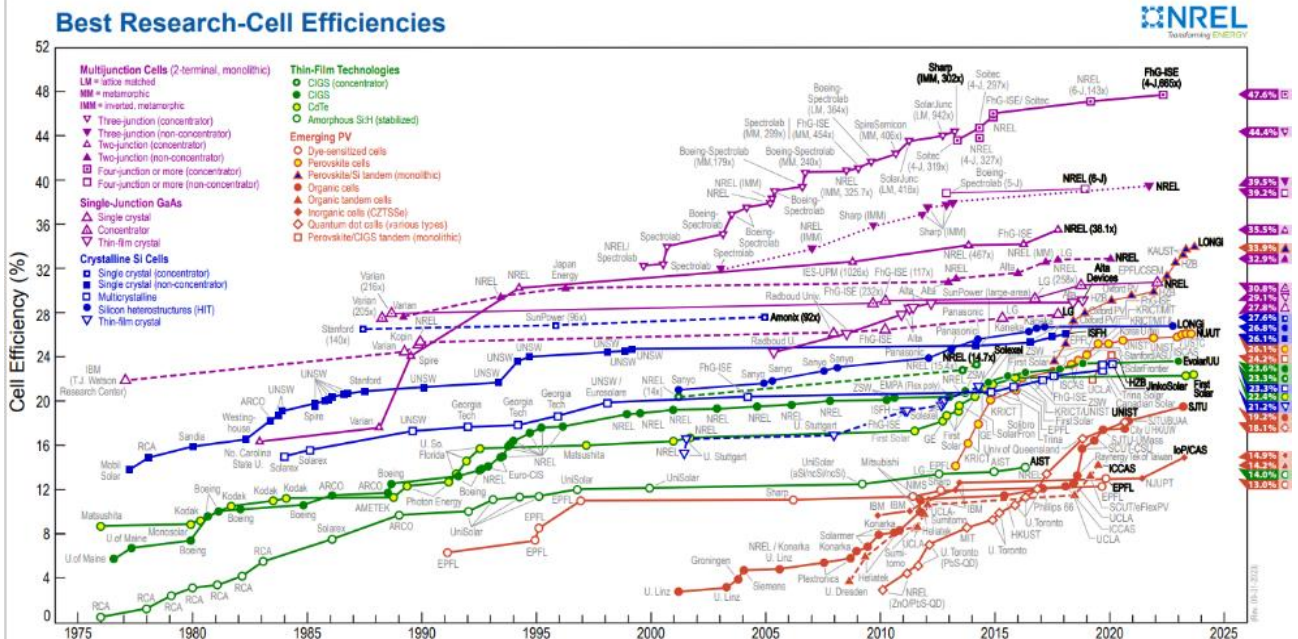


Figure I. 17: Évolution des performances records en photovoltaïque [40]

I.4.1. Début des cellules solaires en silicium

Les cellules solaires de première génération sont initialement construites à partir de silicium. Ces cellules sont parmi les plus anciennes et les plus couramment utilisées. Les cellules solaires à base de silicium cristallin, qui utilisent le silicium comme matériau principal, sont considérées comme durables car le silicium est non toxique et abondant dans la croûte terrestre. Il existe deux types de cellules solaires à base de silicium cristallin : le monocristallin (mono-Si), constitué d'un seul cristal qui offre une uniformité visuelle qui lui donne un rendement de conversion élevé et le multicristallin (mc-Si), composé de plusieurs domaines cristallins de tailles variées et orientés de manière aléatoire dans le matériau. Et offre ainsi un coût de production inférieur [41]. Cependant, il a un rendement de conversion moins élevé que le monocristallin. En termes de performances, les cellules monocristallines atteignent un rendement de conversion de laboratoire de 26.8% [42], tandis que les cellules multicristallines atteignent 23.3% [43]. Bien que les cellules mono-Si aient un rendement potentiellement plus élevé, leur coût de fabrication élevé a poussé les chercheurs vers une technologie moins coûteuse basée sur des couches minces. Cette nouvelle approche vise à améliorer le rendement tout en réduisant les coûts de fabrication et d'utilisation des matériaux, attirant ainsi un intérêt croissant dans le domaine commercial.

I.4.2. Progrès ultérieur avec les cellules solaires à couches minces.

Les cellules solaires à films minces (Voir figure I.16) représentent une avancée importante dans la technologie solaire. L'idée principale derrière ces cellules en couches minces est d'utiliser un matériau absorbant avec un fort pouvoir d'absorption optique par rapport au silicium cristallin de première génération. Cette approche permet de créer des cellules avec des couches très minces, de l'ordre du micron, elles sont fabriquées en déposant une ou plusieurs couches minces sur des supports tels que le verre ou le plastique ce qui réduit considérablement les coûts de production. Initialement, le matériau utilisé pour absorber la lumière dans ces couches minces était le silicium amorphe (H:a-Si) . Bien que le processus de fabrication soit moins coûteux en raison de sa réalisation à basse température et de l'utilisation de moins de matériau par rapport au silicium cristallin, les cellules a-Si présentent un rendement de conversion plus faible par rapport à d'autres technologies. Pour améliorer cela, les chercheurs ont exploré

d'autres matériaux tels que le cadmium de tellure (CdTe), le cuivre, l'indium, le gallium et le sélénium (CIGS) ainsi que CZTS et CZTSSe. Ces cellules ont une bande interdite directe, contrairement à la bande interdite indirecte du silicium. De plus, l'épaisseur du film est très fine, beaucoup plus mince que les cellules solaires classiques de première génération. Cette caractéristique confère aux cellules à couches minces une flexibilité et un poids réduits. Ces couches minces permettent une connexion monolithique des cellules, une possibilité qui n'est pas réalisable avec le silicium cristallin. Cela signifie que tous les composants d'un module peuvent être fabriqués sur un seul substrat en une seule fois. En outre, ces cellules sont plus économiques que les cellules solaires de première génération. Le tableau I.1 ci-dessous présente les performances les plus élevées des différents types de cellules solaires de deuxième génération jusqu'à présent [40,43]

Tableau I. 1: Efficacité des différentes cellules de deuxième génération

Les types de cellule à couches minces	Efficacité (%)	Test centre (date)
CIGS	23.6 ±0.5	FhG-ISE
CdTe	22.3±0.2	NREL
CZTSSe	14.9±0.3	NPVM
CZTS	11.4±0.3	NPVM
Si (amorphe)	10.20±0.3	AIST

- FhG-ISE : Institut Fraunhofer pour les systèmes d'énergie solaire
- NREL : Laboratoire national des énergies renouvelables
- NPVM : Centre national chinois de mesure et d'essais de l'industrie photovoltaïque
- AIST : Institut National des Sciences et Technologies Industrielles Avancées

D'après le tableau des tests, il est notable que les cellules CIGS et CdTe sont plus performantes que les trois autres types de cellules. En ce qui concerne, le gallium arséniure (GaAs) est particulièrement utile pour les cellules solaires multi-jonctions, qui ont plusieurs jonctions p-n constituées de différents matériaux semi-conducteurs. Contrairement au silicium, le GaAs permet une conception polyvalente en modifiant les propriétés optoélectroniques grâce à l'incorporation de différentes substances dopantes et la combinaison avec d'autres matériaux III-V[44]. De plus, le GaAs a une capacité d'absorption élevée, ce qui signifie qu'une cellule mince de quelque micromètre peut absorber le spectre solaire, contrairement au silicium cristallin qui nécessite des cellules plus épaisses de 100 microns ou même plus. Pour les cellules GaAs, le rendement varie entre 18.4% et 29.1%, selon la structure cristalline ou la couche mince[45]. Toutes les cellules solaires de premières et deuxièmes générations ont une limite maximale théorique d'efficacité d'environ 33 %, sans prendre en compte

les pertes dues aux défauts optiques et matériels. Cette limite est connue sous le nom de limite de Shockley-Queisser (S-Q) [46], illustrée sur la figure I.18 pour différents matériaux photovoltaïques.

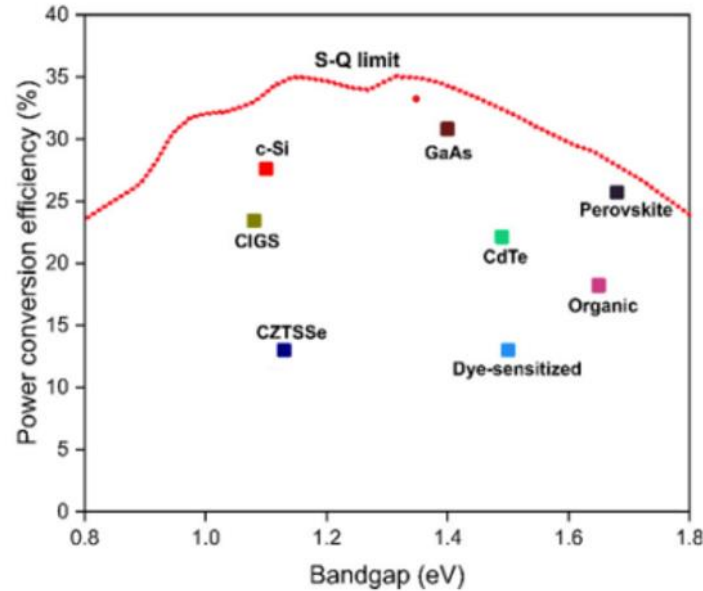


Figure I. 18 : Limite de Shockley-Queisser pour divers matériaux photovoltaïques. Ce graphique est utilisé avec l'autorisation de [46]

Le matériau GaAs offre le meilleur taux de conversion d'énergie, mais la fabrication de cellules solaires en GaAs est chère, tout comme celle des cellules en silicium monocristallin. En revanche, les cellules solaires CIGS et CdTe sont moins coûteuses à fabriquer et offrent un rendement de conversion raisonnable. De plus, elles sont considérées comme des concurrents sérieux des cellules en silicium sur le marché mondial de l'énergie solaire. Notre contribution à cette avancée a été formalisée à travers une publication nationale intitulée "Optimisation de l'absorbeur d'une cellule solaire CIGS à l'aide du simulateur SCAPS-1D" [47]. Cette recherche vise à optimiser l'efficacité des cellules CIGS, renforçant ainsi leur positionnement concurrentiel par rapport aux cellules en silicium.

I.4.3. Continuation du développement avec les cellules solaires émergentes.

La troisième génération a été développée pour rendre les appareils plus performants et se rapprocher de la limite de Carnot, qui est environ 62 % supérieure à la limite de Shockley-Queisser (33 %) [48]. L'objectif est d'améliorer l'efficacité des dispositifs en utilisant des méthodes spéciales pour appliquer des couches très fines, similaires à celles utilisées pour la deuxième génération, ou en explorant de nouveaux

designs et matériaux, y compris les concepts de multi-jonctions 'tandem'. Les cellules solaires de troisième génération diffèrent des cellules solaires de première et deuxième génération en raison du fait qu'elles n'utilisent pas une jonction p-n traditionnelle pour séparer les porteurs de charge photo-générés. Au lieu de cela, elles sont constituées de multiples niveaux d'énergie, génèrent des paires de porteurs multiples et sont capables de capturer les porteurs avant la thermalisation. Parmi les technologies incluses dans les cellules solaires de troisième génération, on trouve les cellules solaires sensibilisées par des colorants (DSSC), également appelées "cellules Grätzel", les cellules à base de pérovskite (PSC), les cellules solaires sensibilisées à points quantiques (DQSC) et les cellules solaires organiques (OSC). Une de ces technologies qui a récemment attiré beaucoup d'attention est celle des cellules à base de pérovskite, faisant partie des technologies solaires les plus avancées, affichant des rendements élevés dépassant les 26% (Voir tableau I.2). [40,43]

Tableau I. 2 : Efficacité des différentes cellules de troisième génération

Les types de Cellule hybride	Efficacité (%)	Teste centre, date
PSC	26.0±0.5	JET
OSC	19.2±0.3	NREL
DQSC	18.1	NREL
DSSC	13.0 ±0.4	FhG-ISE

- JET : Laboratoires japonais de sécurité électrique et de technologie de l'environnement.

I.4.4. Les dernières avancées dans les cellules solaires(hybrides).

Les cellules solaires de quatrième génération, également appelées cellules solaires hybrides ou "organiques-inorganiques", représentent la dernière avancée dans la technologie des cellules solaires. Ces cellules photovoltaïques combinent le faible coût et la flexibilité des films minces polymères avec la stabilité des nanostructures organiques telles que les nanoparticules, les oxydes métalliques, les nanotubes de carbone, le graphène et leurs dérivés. Ces dispositifs, souvent désignés sous le nom de "nanophotovoltaïques", pourraient être la future voie prometteuse pour l'énergie solaire [49,50].

I.5. Intérêt des chalcopyrites à couche mince :

Les scientifiques se penchent sur les cellules solaires à couche mince afin de résoudre le principal obstacle actuel au développement de l'énergie solaire photovoltaïque, à savoir les coûts élevés associés aux panneaux solaires. À l'échelle

mondiale, les laboratoires de recherche s'engagent à améliorer le rendement de conversion des cellules tout en réduisant les coûts. Cette réduction des coûts peut être réalisée en minimisant l'utilisation du matériau absorbant de la cellule, ce qui conduit à la création de cellules plus minces. Afin de garantir une absorption optimale du rayonnement solaire dans un absorbeur en couche mince, il est crucial que son épaisseur dépasse la longueur d'absorption (ou la profondeur de pénétration $1/\alpha$ du photon). Ceci nécessite l'utilisation de matériaux semi-conducteurs absorbeurs caractérisés par un fort coefficient d'absorption et un gap direct. Les matériaux tels que le CdTe et le CIGS, utilisés dans les cellules photovoltaïques en couches minces de deuxième génération, répondent à ces critères. Typiquement, l'épaisseur d'une cellule en couches minces est d'environ 2 μm , soit 100 à 200 fois moins que celle d'une cellule en silicium cristallin [51]. Cette minceur permet d'économiser des matériaux, de réduire le temps de production et l'énergie nécessaire à la fabrication des cellules solaires, conduisant ainsi à une baisse des coûts des modules solaires et à une augmentation significative de leur volume de production. La fabrication à moindre coût est rendue possible par l'utilisation de substrats souples tels que le verre, le métal, le plastique ou la céramique, offrant un avantage majeur aux cellules en couches minces. Ces cellules sont également plus légères et flexibles que les cellules solaires traditionnelles, facilitant leur intégration dans diverses applications et structures. En matière de conversion d'énergie lumineuse, les cellules solaires à base de chalcogénure de CuInGaSe_2 (CIGS) et de tellure de cadmium (CdTe) se distinguent par leurs performances exceptionnelles. Les cellules solaires CIGS, par exemple, ont affiché des rendements dépassant les 23.6 %, tandis que les cellules solaires CdTe ont atteint un rendement de conversion de 22.3 %. Toutefois, il est important de noter que les cellules solaires CdTe posent un défi environnemental en raison de la toxicité du cadmium, un composant inhérent à leur structure. À l'échelle cellulaire, le CIGS se distingue par sa supériorité par rapport au CdTe en termes de rigidité, de flexibilité et de semi-transparence comme illustré sur la figure I.19. Bien que la cellule solaire à pérovskite (Pk) soit considérée comme une technologie émergente, sa commercialisation est retardée par rapport au CIGS et au CdTe, principalement en raison de rendements élevés obtenus à une échelle réduite [52]. En outre, l'évolution technologique est représentée graphiquement sur la figure I.20, où l'efficacité est tracée en fonction de l'année.

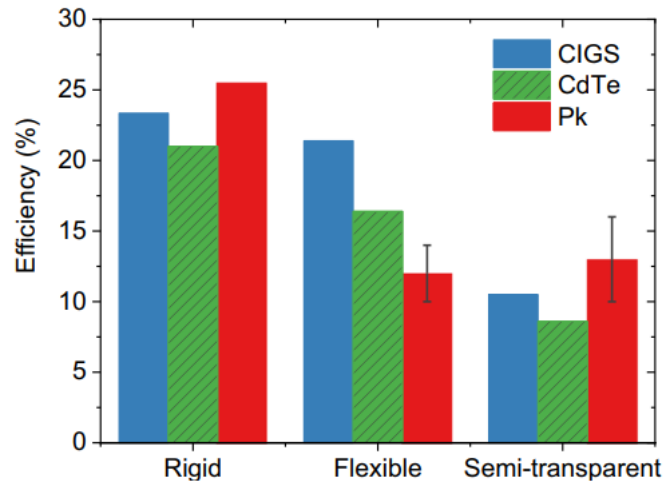


Figure I. 19: Record d'efficacité pour diverses technologies commerciales et émergentes de couches minces sur substrats rigides et flexibles et pour les architectures semi-transparentes [52]

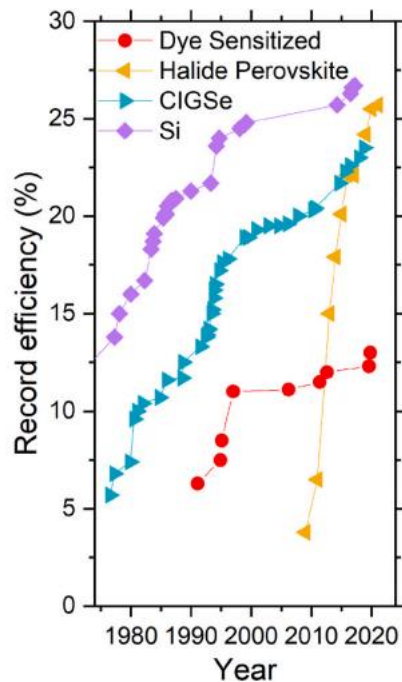


Figure I. 20: Record d'efficacité en fonction d'année pour quatre technologies photovoltaïques à jonction unique [53]

Le graphe présenté sur la figure I.20 met en lumière les différences notables entre diverses générations de cellules solaires. Les résultats indiquent clairement que les cellules de première génération à base de silicium (Si) présente un niveau d'efficacité élevé. En revanche, les cellules solaires de quatrième génération, qui utilisent des sensibilisateurs de colorants (DyeSensitized), affichent une efficacité nettement plus faible. En parallèle, nous observons une augmentation exponentielle des cellules

solaires de troisième génération à base de pérovskites halogénées, en comparaison avec les technologies à couches minces CIGS de deuxième génération, qui présentent une augmentation moins prononcée par rapport aux pérovskites. Bien que cette croissance soit évidente en raison des excellentes propriétés et performances des pérovskites aux halogénures, le retour sur investissement moyen semble comparable pour les deux technologies. Cela suggère que l'augmentation exponentielle peut être attribuée davantage à l'expansion du nombre d'études de recherche et d'efforts déployés, plutôt qu'à une différence qualitative de technologie. Malgré les performances exceptionnelles des pérovskites aux halogénures, des problèmes de stabilité à long terme limitent encore leur potentiel commercial, principalement en raison de leur sensibilité à l'humidité et à la chaleur [54]. En revanche, les cellules solaires CIGS présentent une stabilité à long terme supérieure, les positionnant comme une option plus fiable pour les applications photovoltaïques. De plus, bien que les cellules CIGS offrent un rendement abordable, des études en cours visent à accroître leur efficacité. Leur faible coût de production et l'abondance de leurs matériaux les positionnent comme une option compétitive par rapport à d'autres technologies [55]. En outre, le potentiel d'application à grande échelle d'une technologie photovoltaïque ne repose pas uniquement sur son rendement, mais également sur son intégration réussie avec des techniques industrielles évolutives. Par conséquent, il est crucial que les nouveaux concepts puissent être mis en œuvre en utilisant des méthodes industriellement viables et évolutives.

I.6. Les cellules solaires à base des composés CIGS

Les cellules solaires à couche mince basées sur la structure de chalcopyrite CIGS sont des dispositifs à hétérojonctions composés d'un empilement de multiples couches présentant des propriétés fonctionnelles distinctes. En partant de la base de la cellule, on distingue successivement le substrat, le contact arrière, l'absorbeur, la couche tampon, et enfin, la couche fenêtre. Chaque élément contribue de manière spécifique au fonctionnement global de la cellule, démontrant ainsi une organisation précise et un rôle déterminant dans le processus photovoltaïque. La figure I.21 illustre la configuration standard de ces cellules.

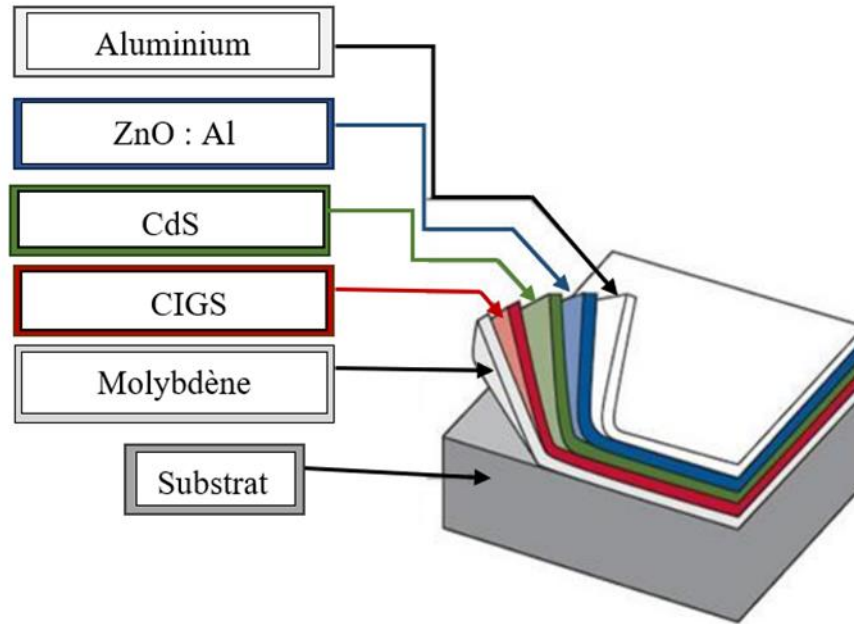


Figure I. 21: Configuration de la cellule solaire à base de CIGS

I.6.1. Substrat

Le choix du substrat représente la première étape fondamentale lors de la conception d'une cellule solaire, nécessitant la prise en compte de divers critères chimiques et mécaniques. Il est essentiel que le substrat réponde à ces critères pour assurer la qualité tout au long du processus de fabrication de la cellule, sans nuire à ses performances, tout en demeurant économiquement viable. Parmi les paramètres à considérer, on peut citer la rigidité du substrat, son coefficient de dilatation, sa température maximale d'utilisation, ainsi que l'importance d'une surface parfaitement lisse. En général, les substrats employés se classent en trois catégories principales : le verre, les métaux et les polymères. Un choix fréquemment privilégié est le substrat en verre sodocalcique (SLG, acronyme pour Soda Lime Glass), en raison de sa facilité de production à grande échelle et de son coût abordable. Ce type de verre présente un coefficient de dilatation thermique de $9 \times 10^{-6} / \text{K}$, qui offre une excellente concordance pour les films CIGS et Mo. Il est composé à 73% de silicate, 14% de Na_2O et 9% de CaO en masse. En outre, il contient d'autres éléments en quantités minimales (<1%) [56,57]. Ces constituants entraînent la présence d'impuretés, notamment de métaux alcalins tels que le sodium (Na), qui diffusent au cours du processus dans les films de Mo et de CIGS. Pour pallier ce problème, de nombreux fabricants ont opté pour l'application d'une couche barrière, telle que SiO_2 ou Al_2O_3 , entre le verre et le

molybdène. Cette couche barrière agit comme un bloqueur contrôlé, considéré comme une source maîtrisée de sodium. Le verre sodocalcique présente un inconvénient majeur lié à la présence de diverses impuretés, ce qui limite sa capacité à être chauffé à des températures élevées. Plus précisément, il peut uniquement être chauffé jusqu'à environ 550 °C, au-delà duquel il perd de sa stabilité, se ramollit et commence à se déformer. Afin de surmonter ces défis, des efforts de recherche ont été déployés pour concevoir un type de verre stable à haute température, capable de supporter des températures dépassant 600 °C, tout en affichant un coefficient de dilatation thermique approprié. Les premières expérimentations avec le verre à haute température ont révélé des résultats prometteurs, suggérant une augmentation significative de l'efficacité des dispositifs destinés aux cellules solaires chalcopyrites. Des épaisseurs de verre de 1 à 3 mm sont généralement utilisées. [57,58]

I.6.2. Contact arrière

Le contact arrière, agissant en tant que pôle positif du générateur photovoltaïque, se compose d'un métal déposé par pulvérisation cathodique sur le substrat, situé à la partie inférieure de l'absorbeur. Cette couche a pour fonction de collecter les porteurs à partir de l'absorbeur et de les acheminer vers la charge externe. Afin de remplir efficacement cette fonction, le matériau du contact arrière doit répondre à des critères chimiques, mécaniques et économiques spécifiques. Divers métaux ont été examinés à cet effet, notamment le tungstène, le chrome, le tantale, le manganèse, l'or, l'aluminium, l'argent et le cuivre. Parmi ces options, le molybdène émerge comme le choix le plus fréquent pour le contact arrière des cellules solaires CIGS, tant dans les laboratoires de recherche que dans l'industrie. Cette préférence s'explique par la stabilité relative du molybdène aux températures élevées rencontrées au cours du processus de fabrication du CIGS (environ 550 à 600 °C) [59]. Le molybdène démontre une résistance adéquate aux différents traitements thermiques nécessaires à la fabrication des cellules solaires en raison de sa faible résistance de contact avec le CIGS, de son coefficient d'expansion thermique adapté et de sa faible résistance de contact avec l'absorbeur. Fondamentalement, le molybdène remplit le rôle essentiel d'un contact métallique, collectant les porteurs pour les transmettre à la charge externe. De plus, il se caractérise par une excellente conductivité électrique. Typiquement, l'épaisseur de son varie entre 200 nm et 1000 nm. [59,60]

I.6.3. Contact avant

Le contact avant est établi en intégrant une grille de Ni-Al sur la couche fenêtre, conçue pour minimiser les pertes ohmiques en améliorant la collecte des charges générées par le dispositif. Une couche d'accroche de Ni d'environ 50 nm est utilisée pour éviter l'oxydation de l'Al (environ 1 μm) en raison de la présence du TCO en dessous. La méthode courante de dépôt des grilles est l'évaporation, réalisée à l'aide d'un masque de dépôt. Pour réduire les pertes par réflexion, une couche antireflet en MgF_2 d'environ 50 nm d'épaisseur est fréquemment ajoutée au-dessus de la cellule, améliorant ainsi l'efficacité de la capture de la lumière incidente. Enfin, une opération d'encapsulation est entreprise pour assurer la protection mécanique et prévenir la corrosion[57].

I.6.4. Couche fenêtre

La couche fenêtre, également connue sous le nom d'électrode supérieure, joue un rôle crucial dans la collecte des porteurs dans les cellules solaires. Typiquement constitué d'un matériau tel que l'oxyde de zinc impliqué, cette couche est déposée par pulvérisation cathodique. Son objectif principal est de restreindre les pertes électroniques. Toutefois, le ZnO peut présenter une résistance élevée, pouvant nuire aux performances des cellules solaires lorsqu'il est utilisé seul. Ainsi, il est fréquemment combiné avec des matériaux tels que l'ITO (oxyde d'indium-étain) et l'AZO (oxyde de zinc-aluminium). Il est important de noter que l'ITO contient de l'indium, un élément relativement rare, toxique et coûteux. En comparaison, l'AZO, principalement composé d'aluminium et de zinc, peut offrir une alternative plus économique du point de vue des matières premières. En outre, le matériau AZO, en tant qu'oxyde conducteur transparent (OTC), tel que ZnO: Al (AZO), peut améliorer simultanément la conductivité électrique et la transparence de la couche fenêtre. Cela contribue finalement à augmenter l'efficacité globale de la cellule solaire[61,62].

I.6.5. Couche tampon

La couche tampon, généralement constituée de soufre de cadmium (CdS), agit en tant que semi-conducteur de type n dans l'hétérojonction PN formé entre le matériau absorbant à base de CIGS et le CdS. Cette jonction facilite la séparation des porteurs de charge. De plus, le CdS possède la capacité de neutraliser les défauts de surface de

l'absorbant. Cependant, en raison de la largeur de bande de 2.4 eV du CdS, des pertes d'absorption significatives surviennent, même lorsque des épaisseurs inférieures à 60 nm sont utilisées pour cette couche. En outre, la discontinuité au niveau de l'hétérojonction CdS/CIGS entrave le mouvement des électrons et des trous. Généralement, le dépôt du CdS s'effectue par bain chimique (Chemical Bath Deposition, CBD). Cependant, étant donné que la CBD est un procédé chimique humide, elle n'est pas directement compatible avec le traitement sous vide. De plus, en raison de la perte du cadmium, d'importantes recherches ont été menées pour développer des couches tampons alternatives et des techniques de dépôt de remplacement [63]. Diverses matériaux ont été explorés, notamment des couches tampons à base de ZnTiO [64], In₂S₃[65], In_x(OH, S)_y[66], InSe[67], et Cd(Zn,S)[68], GaSe[69]. Dans la malheureuse réalité, un grand nombre de ces couches tampons contiennent des éléments nocifs tels que l'indium, le titane, le gallium, voire même le cadmium. Cependant, en contrepartie, d'importants investissements ont été réalisés pour éliminer des matériaux dépourvus de substances toxiques, notamment le ZnSe[70], le Zn(O,S)[71], et le SnS₂[72]. Le chapitre suivant se consacrera à une étude comparative approfondie de ces nouveaux matériaux par rapport au CdS, visant à sélectionner celui qui convient le mieux à notre cellule.

I.6.6. Couche absorbante

Cette couche, également désignée sous le terme « absorbeur », joue un rôle crucial dans la structure des cellules solaires photovoltaïques. Elle constitue la région où les photons subissent une conversion en paires électron-trou. Le matériau Cu(In, Ga)Se₂, souvent abrégé en CIGS. L'un des matériaux les plus prometteurs est sans aucun doute le CIGS, qui offre de très bonnes performances en termes de durée de vie et de transformabilité tout en conservant une bonne efficacité de conversion. Le sélénium de cuivre-indium (CIS) et le séléniure de cuivre-gallium (CGS) sont des composés ternaires d'une solution solide de Cu(In_{1-x}, Ga_x)Se₂, appartenant aux éléments quaternaires I, III et VI du tableau périodique. Cet élément chimique se caractérise par ses propriétés de semi-conducteur de type p à bande directe interdite, présente une composition et des propriétés variables en fonction du taux de substitution entre l'indium et le gallium. Typiquement, la composition privilégiée pour les cellules solaires correspond à un rapport Ga/(Ga + In) d'environ 0.3, ce qui équivaut à un écart énergétique compris entre 1.1 et 1.2 eV. La chalcopyrite CIGS serait une option

prometteuse pour les futures technologies de films minces (PV) en raison de son coefficient d'absorption élevé d'environ 10^7 m^{-1} , et de sa bonne réponse spectrale sur une large gamme de longueurs d'onde dans le spectre solaire pour des épaisseurs d'environ $2 \mu\text{m}$. Diverses techniques de dépôt, notamment la co-évaporation, la pulvérisation cathodique et la galvanoplastie, sont utilisées pour appliquer la couche de CIGS dans la fabrication des cellules solaires. [73,74]

I.7. Utilisation du logiciel SCAPS-1D et caractérisation de la cellule :

La simulation des cellules en couches minces a connu une popularité croissante ces dernières années, conduisant au développement de plusieurs logiciels dédiés par la communauté de chercheurs. Parmi ces outils, on retrouve des logiciels tels que AMPS-1D, PC-1D, ASA, SCAPS-1D, SILVACO, etc.

Notamment, SCAPS (Solar Cell Capacitance Simulator) émerge en tant que logiciel de simulation numérique spécifiquement conçu pour les cellules solaires en couches minces à hétérojonction. Conçu à l'université de Gent en Belgique par Marc Burgelman et ses collègues, en utilisant LabWindows/CVI de National Instruments, SCAPS a été mis à disposition de la communauté de recherche photovoltaïque après la deuxième Conférence mondiale sur l'énergie photovoltaïque en 1998[75].

Le programme SCAPS 1-D résout les équations pour des structures comportant plusieurs couches semi-conductrices, chacune avec un profil de dopage arbitraire, ainsi qu'une distribution énergétique variable des niveaux profonds des donneurs ou des accepteurs, sous différents niveaux d'éclairement. L'algorithme effectue des itérations jusqu'à la convergence des équations. Initialement développé pour les structures des cellules de la famille CIGS et CdTe, SCAPS offre la possibilité de simuler des cellules solaires composées d'au plus sept couches, chacune ayant des propriétés distinctes telles que l'épaisseur, les deux types de dopage, la distribution énergétique des niveaux donneurs ou accepteurs, l'absorption optique, etc.

Les performances de la cellule solaire sont évaluées à l'aide de quatre paramètres électriques : la densité de courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF), et le rendement de conversion (η). La simulation peut montrer sur la figure I.22 la caractéristique de la courbe de densité de courant/tension ($J(V)$) pour la cellule solaire.

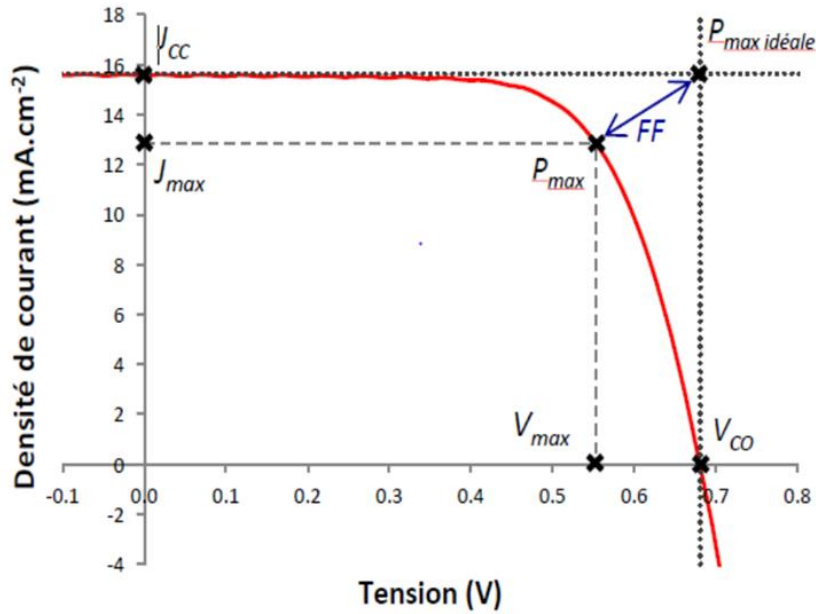


Figure I. 22: Caractéristiques $J(V)$ d'une cellule solaire [76]

- **La densité de courant de court-circuit**

La densité de courant de court-circuit (J_{CC} ou J_{sc} en anglais) représente le courant qui traverse une unité de surface d'une cellule photovoltaïque lorsque aucune différence de potentiel n'est appliquée à ses bornes comme indique l'équation I.11. Il s'agit de la valeur maximale de courant qu'une cellule PV peut produire et dépend principalement de l'intensité lumineuse et de la surface de la cellule. Dans cette situation, la puissance fournie par la cellule ($P = U \times I$) est nulle. La densité J_{sc} est influencée par des facteurs tels que l'intensité lumineuse, les propriétés optiques de la cellule, l'épaisseur de la jonction p-n, la probabilité de collection, la surface éclairée, la longueur d'onde du rayonnement et la température. [24,76]

$$J_{sc} = J(V = 0) \quad (I.11)$$

- **La tension de circuit-ouvert**

La tension de circuit ouvert est la différence de potentiel mesurée aux bornes d'une cellule lorsqu'elle n'envoie pas de courant dans le circuit externe. Cette tension, notée V_{oc} , est déterminée par la nature des matériaux de la couche active de la cellule et les cinétiques de recombinaison des porteurs à l'intérieur du dispositif. L'équation (I.12) exprime la relation lorsque le courant est nul, tandis que l'équation (I.13) décrit comment la tension V_{oc} est influencée par le rapport entre densité de photo-courant J_{ph}

et l courant de saturation J_0 . Cette dépendance est principalement liée à la température de la cellule solaire et au spectre de l'éclairement [76].

$$V_{oc} = V (J = 0) \quad (I.12)$$

$$V_{oc} = \frac{nkT}{q} \left(\ln \frac{J_{ph}}{J_0} + 1 \right) \quad (I.13)$$

- **Le facteur de forme**

Le facteur de forme (FF) représente le rapport entre la puissance maximale réelle (P_{max}) et la puissance maximale idéale ou théorique (P_{th}), comme illustré dans l'équation I.14. Lorsque la cellule solaire présente un comportement idéal, les surfaces des deux rectangles dans la figure sont plus proches, ce qui entraîne une augmentation de la valeur du facteur de forme. Ce facteur, toujours inférieur à 1, est utilisé pour évaluer la qualité de la cellule solaire. [25,56]

$$FF = \frac{P_{max}}{P_{th}} = \frac{V_{max} \times J_{max}}{V_{oc} \times J_{sc}} \quad (I.14)$$

- **Le rendement de conversion de puissance**

Le rendement de conversion de puissance, noté PCE, mesure l'efficacité d'une cellule solaire à convertir la lumière en électricité. Il est calculé en divisant la puissance maximale générée par la cellule (P_{max}) par la puissance lumineuse incidente (P_{in}) par unité de surface. La formule de calcul, dérivée à partir de la courbe $J(V)$ sous éclairement, est représentée par l'équation (I.15). Dans des conditions de test standard (STC), la puissance lumineuse incidente est généralement fixée à 1000 W/m^2 [24,76]

$$PCE = \frac{V_{oc} \times J_{sc} \times FF}{P_{in}} \quad (I.15)$$

- **L'efficacité quantique**

Le rendement quantique, ou QE, est un paramètre essentiel dans l'étude des cellules solaires. Il mesure la probabilité de transfert d'énergie d'un photon à un électron dans le cristal, décrivant ainsi la qualité et la quantité de la conversion photovoltaïque. L'efficacité quantique externe (EQE) mesure le rapport entre les électrons collectés et les photons incidents, tandis que l'efficacité quantique interne (EQI) se rapporte au nombre de photons absorbés, prenant en compte les pertes optiques telles que la

réflectivité (R). Ces mesures permettent de déterminer la plage de longueurs d'onde dans laquelle une cellule solaire fonctionne le mieux, offrant des indications sur la qualité des matériaux et des contacts utilisés [77,25]

$$EQE = \frac{I(\lambda)}{\phi_p(\lambda).q} \quad (I.16)$$

$$EQI = \frac{EQE}{1-R} \quad (I.17)$$

Cette grandeur permet d'évaluer la réponse d'une cellule solaire dans différentes plages de longueurs d'onde, fournissant ainsi des indications sur la qualité des matériaux et des contacts utilisés. [77]

I.8. Conclusion

En conclusion, notre premier chapitre a abordé diverses méthodes de conversion d'énergie, se concentrant ensuite sur les cellules solaires photovoltaïques. Nous avons commencé par décrire le principe de fonctionnement général d'une cellule solaire, mettant l'accent sur la compréhension d'une hétérojonction et du modèle d'Anderson. Par la suite, nous avons exploré les filières photovoltaïques, caractérisées par plusieurs cellules à base de matériaux semi-conducteurs. Nous avons approfondi notre analyse en nous intéressant spécifiquement aux cellules solaires à couche mince, en mettant en lumière la cellule solaire CIGS (Cuivre, Indium, Gallium, Sélénium). Dans cette catégorie, nous avons examiné les différentes couches constitutives et introduit le modèle de SCAPS-1D. Notre prochaine étape consistera à approfondir notre compréhension des cellules solaires CIGS en simulant leur fonctionnement dans le chapitre suivant.

Références :

- [1] Eze, Val Hyginus Udoka, Enerst Edozie, Umaru Kalyankolo, O. Okafor, Chinyere N. Ugwu, and Fabian Chukwudi Ogenyi. "Overview of renewable energy power generation and conversion (2015-2023)." (2023).
- [2] www.iea.org, "World Energy Investment 2023," International Energy Agency (IEA), pp. 1–181, (2023)
- [3] Meddour, Sami. Méthodologies de conception et d'optimisation d'une chaîne de conversion d'énergie renouvelable. Diss. Université Larbi Ben M'hidi Oum El Bouaghi, (2023).
- [4] Winter, Nicole. "Renewables 2022 Global Status Report United States of America Factsheet." (2022).
- [5] Hamrelaine, Mostapha. Etude et simulation des performances d'une turbine éolienne. Diss. Université Ibn Khaldoun-Tiaret-, (2019).
- [6] European Wind Energy Association. Wind energy-the facts: a guide to the technology, economics and future of wind power. Routledge, (2012).
- [7] Acket, Claude, and Jacques Vaillant. Les énergies renouvelables : état des lieux et perspectives. Editions Technip, (2011).
- [8] Nguyen, Tai Thu. Contribution à l'étude de la formulation et du procédé de fabrication d'éléments de construction en béton de chanvre. Diss. Université de Bretagne Sud, (2010).
- [9] Hossain, Eklas, and Slobodan Petrovic. Renewable Energy Crash Course. Springer International Publishing.,[10] Bahaj, AbuBakr S. "Generating electricity from the oceans." Renewable and Sustainable Energy Reviews 15.7 (2011): 3399-3416. (2021)
- [11] Pahud, Daniel. "Geothermal energy and heat storage." Cannobio: SUPSI DCT LEEE. ScuolaUniversitariaProfessionaledellaSvizzeraItaliana (2002).
- [12] Kosray, M. "Recent Progress in district heating with emphasis on low-temperature systems." Geothermal Energy (2021).
- [13] NAAMA, FATIMA ZOHRA. Modélisation et Amélioration du Rendement Energétique d'un Système de Conversion d'Energie Eolienne Connecté à un Bus HVDC. Diss. Abdallah ZEGAOUI/Michel AILLERIE, (2021).
- [14] Shin, Donghwa, et al. "Battery-supercapacitor hybrid system for high-rate pulsed load applications." 2011 Design, Automation & Test in Europe. IEEE, (2011).
- [15] Gares, Maroua, Serge Hiligsmann, and Noredine Kacem Chaouche. "Lignocellulosic biomass and industrial bioprocesses for the production of second-generation bio-ethanol, does it have a future in Algeria?" SN Applied Sciences 2: 1-19. (2020)
- [16] Akhtar, Ali, Vladimir Krepl, and Tatiana Ivanova. "A combined overview of combustion, pyrolysis, and gasification of biomass." Energy & Fuels 32.7: 7294-7318. (2018)
- [17] Oibileke, KeChrist, et al. "Anaerobic digestion: Technology for biogas production as a source of renewable energy—A review." Energy & Environment 32.2: 191-225. (2021)
- [18] Alalwan, Hayder A., Alaa H. Alminshid, and Haydar AS Aljaafari. "Promising evolution of biofuel generations. Subject review." Renewable Energy Focus 28: 127-139. (2019)
- [19] Deane, Paul. "Stimulating the uptake of liquid biofuels in aviation through existing renewable energy support schemes." Policy 6 (2016).
- [20] Kouki, Nadjat, and Zine SAADI. Etude et Réalisation d'un capteur solaire hybride photovoltaïque thermique destinée à usage domestique. Diss. UNIVERSITE AHMED DRAIA-ADRAR, (2022).
- [21] Darras, Christophe. Modélisation de systèmes hybrides photovoltaïque/hydrogène : applications site isolé, micro-réseau et connexion au réseau électrique dans le cadre du projet PEPITE (ANR PAN-H). Diss. Université Pascal Paoli, (2010).
- [22] hungTran, Cuong. *Améliorations d'une chaîne de conversion de l'énergie solaire en électricité autonome en vue d'application dans les pays en voie de développement.* Diss. Reims, (2019).
- [23] Mambrini, Thomas. Caractérisation de panneaux solaires photovoltaïques en conditions réelles d'implantation et en fonction des différentes technologies. Diss. Paris 11, (2014).
- [24] Slimani, Moulay Ahmed. *Cellules solaires pérovskites imprimées et optimisation des couches pérovskites pour les cellules tandems.* Diss. École de technologie supérieure, (2019).
- [25] Nour Elhouda, B. E. L. A. B. A. S. *Prédiction des propriétés des cellules photovoltaïques à base de nouveaux matériaux semi-conducteurs.* Diss. Faculté des Sciences et Technologies, (2020).

- [26] Khoshsirat, Nima, and NurulAmziah Md Yunus. "Copper-Indium-Gallium-Diselenide (CIGS) nanocrystalline bulk semiconductor as the absorber layer and its current technological trend and optimization." *Nanoelectronics and Materials Development*: 41. (2016)
- [27] Wilson, Susan Lynn. High power grating-outcoupled surface-emitting semiconductor laser. Diss. Southern Methodist University, (2006).
- [28] Schubert, E. Fred. Doping in III-V semiconductors. E. Fred Schubert, (2015).
- [29] Himawan, Feri, et al. "Perancangan Desain Traffic Light Menggunakan Panel Surya." *JEECAE (Journal of Electrical, Electronics, Control, and Automotive Engineering)* 5.1: 49-54 (2020).
- [30] KANOUN, Ahmed-Ali. Etude théorique et prédictive des nouveaux matériaux pour conception des cellules solaires et applications photovoltaïques. Diss. 16-02-2020, (2019).
- [31] Kohen, David. Etude des nanofils de silicium et de leur intégration dans des systèmes de récupération d'énergie photovoltaïque. Diss. Université de Grenoble, (2012).
- [32] S.M. Sze, «Physics of semiconducteurs Devises», 2nd Edition, john wily&sons, (2001).
- [33] Fahrenbruch, Alan, and Richard Bube. *Fundamentals of solar cells: photovoltaic solar energy conversion*. Elsevier, (2012).
- [34] R. L. Anderson; Experiments on Ge-GaAs Heterojunctions ; *Solid State Electronics*, 5 (1962) 341–351
- [35] Diouf, Djicknoum. Cellules photovoltaïques silicium à hétérojonctions et à structures interdigitée en face arrière. Diss. Paris 11, (2010).
- [36] Kaewmeechai, Chaiyawat, YongyutLaosiritaworn, and Atchara Punya Jaroenjittichai. "Band alignment of Cs₂ BX₆ double halide perovskites and TiO₂ using electron affinity rule." *Results in Physics* 42 : 106015. (2022)
- [37] Charles Roger « Développement de cellules photovoltaïques à base de CIGS sur substrats métalliques » Thèse de doctorat, Université de GRENOBLE, (2013).
- [38] Jeffery L. Gray. The Physics of the Solar Cell. In *Handbook of Photovoltaic Science and Engineering*, pages 82–129. (2011).
- [39] Fadhel, Siwar. Efficacité énergétique et surveillance d'un microgrid à courant continu alimenté par des panneaux photovoltaïques. Diss. université Paris-Saclay, (2020).
- [40] Best research-cell efficiencies chart. nrel, (n.d.). <https://www.nrel.gov/pv/cell%02efficiency.html> (accessed december 23, 20)
- [41] Sai, Hitoshi, Hiroshi Umishio, and Takuya Matsui. "Very thin (56 μm) silicon heterojunction solar cells with an efficiency of 23.3% and an open-circuit voltage of 754 mV." *Solar RRL* 5.11: 2100634. (2021)
- [42] Wright, Matthew, et al. "Design considerations for the bottom cell in perovskite/silicon tandems: a terawatt scalability perspective." *Energy & Environmental Science* 16.10: 4164-4190. (2023)
- [43] Almora, Osbel, et al. "Device performance of emerging photovoltaic materials (version 3)." *Advanced energy materials* 11.11: 2002774. (2021)
- [44] J.A. Luceño-Sánchez, A.M. Díez-Pascual, R. Peña Capilla, *Materials for photovoltaics: State of art and recent developments*, *International Journal of Molecular Sciences*. 20 976. (2019)
- [45] M.A. Green, E.D. Dunlop, J. Hohl-Ebinger, M. Yoshita, N. Kopidakis, X. Hao, *Solar cell efficiency tables (version 56)*, *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*. 28 629–638. (2020)
- [46] *Buonomenna, Maria Giovanna. "Inorganic thin-film solar cells: challenges at the terawatt-scale." Symmetry* 15.9: 1718. (2023)
- [47] Benbouzid, Zineb, et al. "OPTIMISATION DE L'ABSORBEUR D'UNE CELLULE SOLAIRE CIGS A L'AIDE DU SIMULATEUR SCAPS-1D." *Communication science et technologie* 11.1: 19-25. (2022)
- [48] Green, Martin A., et al. "Solar cell efficiency tables (version 56)." *Progress in Photovoltaics: Research and Applications* 28.7: 629-638. (2020)
- [49] C.M. Hussain, *Handbook of nanomaterials for industrial applications*, Elsevier, (2018)
- [50] Wu, Congcong, et al. "Multifunctional nanostructured materials for next generation photovoltaics." *Nano Energy* 70: 104480. (2020)
- [51] Ramanujam, Jeyakumar, et al. "Flexible CIGS, CdTe and a-Si: H based thin film solar cells: A review." *Progress in Materials Science* 110: 100619. (2020)
- [52] de Wild, Jessica, et al. "Dielectric Front Passivation for Cu (In, Ga) Se₂ Solar Cells: Status and Prospect." *Advanced Energy and Sustainability Research* 4.2: 2200132. (2023)

- [53] Dale, Phillip J., and Michael A. Scarpulla. "Efficiency versus effort: A better way to compare best photovoltaic research cell efficiencies?" *Solar Energy Materials and Solar Cells* 251: 112097. (2023)
- [54] Duan, Leiping, et al. "Stability challenges for the commercialization of perovskite–silicon tandem solar cells." *Nature Reviews Materials* 8.4: 261-281. (2023)
- [55] Suresh, Sunil, and Alexander R. Uhl. "Present status of solution-processing routes for Cu (In, Ga)(S, Se) 2 solar cell absorbers." *Advanced Energy Materials* 11.14: 2003743. (2021)
- [56] Buffiere, Marie. Synthèse et caractérisation de couches minces de Zn (O, S) pour application au sein des cellules solaires à base de Cu (In, Ga) Se₂. Diss. Université de Nantes, (2011).
- [57] Willoughby, Arthur. *Solar cell materials: developing technologies*. John Wiley & Sons, (2014).
- [58] T. Unold and CA Kaufmann; *Chalcopyrite Thin-Film Materials and Solar Cells*, in *comprehensive renewable energy*; Elsevier, Volume 1 399 – 422(2012)
- [59] Hamtaei, Sarallah, et al. "A review on barrier layers used in flexible stainless-steel based CIGS photovoltaic devices." *npj Flexible Electronics* 7.1: 36. (2023)
- [60] Hu, K., et al. "Evident thickness effect on structure and mechanical properties of molybdenum films." *Thin Solid Films* 768 : 139724. (2023)
- [61] Verrier, Claire. Fabrication et caractérisation avancée de cellules photovoltaïques à base de nanofils de ZnO. Diss. Université Grenoble Alpes, (2017).
- [62] Ravichandran, K., et al. "Properties of sprayed aluminum-doped zinc oxide films—a review." *Materials and Manufacturing Processes* 31.11: 1411-1423. (2016)
- [63] Siebentritt S ; Alternative buffers for chalcopyrite solar cells ; *Solar Energy*, 77(6) 767–775. (2004)
- [64] Hwang, Suhwan, et al. "Wet pretreatment-induced modification of Cu (In, Ga) Se₂/Cd-free ZnTiO buffer interface." *ACS applied materials & interfaces* 10.24: 20920-20928. (2018)
- [65] Abou-Ras, D., et al. "Microstructural and chemical studies of interfaces between Cu (In, Ga) Se₂ and In₂S₃ layers." *Journal of applied physics* 97.8 (2005).
- [66] Huang, C. H., et al. "Study of Cd-free buffer layers using In_x (OH, S) _y on CIGS solar cells." *Solar energy materials and solar cells* 69.2: 131-137. (2001)
- [67] Konagai, M., Y. Ohtake, and T. Okamoto. "Development of Cu (InGa) Se₂ thin film solar cells with Cd-free buffer layers." *MRS Online Proceedings Library (OPL)* 426 (1996).
- [68] Bouich, Amal, et al. "Electrodeposited CdZnS/CdS/CIGS/Mo: characterization and solar cell performance." *Jom* 72: 615-620. (2020)
- [69] Al-Hattab, Mohamed, et al. "Numerical simulation of a new heterostructure CIGS/GaSe solar cell system using SCAPS-1D software." *solar energy* 227: 13-22. (2021)
- [70] Minegishi, Tsutomu, Shingi Yamaguchi, and Masakazu Sugiyama. "Efficient hydrogen evolution from water over thin film photocathode composed of solid solutions between ZnSe and Cu (In, Ga) Se₂ with composition gradient." *Applied Physics Letters* 119.12 (2021).
- [71] Li, Haoran, et al. "Controllable and innovative preparation of Zn (O, S) buffer layers for CIGS thin film solar cells." *Optical Materials* 138: 113711. (2023)
- [72] Gedi, Sreedevi, et al. "SnS₂ nanoparticles and thin film for application as an adsorbent and photovoltaic buffer." *Nanomaterials* 12.2: 282. (2022)
- [73] Jung, Sunghun, et al. "Effects of Ga contents on properties of CIGS thin films and solar cells fabricated by co-evaporation technique." *Current Applied Physics* 10.4: 990-996. (2010)
- [74] Barman, B., and P. K. Kalita. "Influence of back surface field layer on enhancing the efficiency of CIGS solar cell." *Solar Energy* 216: 329-337. (2021)
- [75] A. Niemegeers, M. Burgelman, K. Decock, J. Verchraegen, S. Degraeve "SCAPS3201 Manual". ELIS, September (2013)
- [76] Mabvuer, F. T., Nya, F. T., & Kenfack, G. M. D. Improving the absorption spectrum and performance of CIGS solar cells by optimizing the stepped band gap profile of the multilayer absorber. *Solar Energy*, 240, 193-200, (2022).
- [77] LAZNEK, Samira. Simulation numérique des caractéristiques électriques d'une cellule solaire pin à puits quantiques à base de mixture d'Aluminium et d'Arséniure de Galium. Diss. Université Mohamed Khider de Biskra, (2019).

II. Chapitre :

Choix des matériaux des couches ETL et BSF de la cellule solaire à base
de CIGS

II.1. Introduction

Actuellement, les cellules photovoltaïques inorganique à base de chalcopyrite CIGS présentent un rendement global de 23.35 % en conditions de laboratoire, avec l'utilisation du CdS conventionnel en tant que couche tampon. [1-3]. Cependant, il est important de noter que la jonction CIGS/CdS présente un inconvénient majeur lié à la toxicité de Ga (Gallium) et de In (Indium) ainsi que le Cd (Cadmium), ce qui engendre des préoccupations touchant l'environnement et la santé humaine [4,5]. Ce travail de recherche se concentre sur la résolution de ces problèmes, tout en travaillant à la réduction des coûts des expérimentations associées aux cellules solaires CIGS. Nous entamerons notre démarche en présentant le dispositif de la cellule solaire que nous souhaitons modéliser et optimiser, en effectuant une étude détaillée des caractéristiques propres à chaque couche utilisée en tant que paramètre d'entrée dans la simulation numérique. Pour conduire nos simulations, nous exploiterons la version 3.3.10 du logiciel SCAPS-1D (Solar Cell Capacitance Simulator one Dimension). Afin d'optimiser la cellule solaire CIGS. Dans le premier volet de notre étude, nous effectuons une analyse comparative des effets de différents matériaux des couches de transport d'électrons (ETLs) sur les performances globales du dispositif de la cellule solaire. Ensuite, nous faisons une deuxième étude comparative des diverses couches de transport de trous (HTLs) également connues sous le nom de couche de champ de surface arrière (BSF), afin de réduire l'épaisseur de la couche absorbante CIGS et d'améliorer l'efficacité énergétique de la cellule solaire.

En parallèle, nous analysons en détail les phénomènes de génération et de recombinaison ainsi que le champ électrique qui jouent un rôle important dans les performances de la cellule étudiée. De plus, nous incorporons également des diagrammes de bande d'énergie, pour une évaluation complète. Nous exposons les résultats obtenus et analysons l'impact des divers paramètres sur les performances de notre cellule solaire. D'un point de vue physique, ces paramètres démontrent une corrélation significative. Cependant, nous modifions systématiquement ces paramètres de manière indépendante dans le but d'évaluer une estimation précise et de mieux comprendre leur influence sur les propriétés de sortie de la cellule étudiée.

II.2. Présentation de la cellule photovoltaïque étudiée

Le schéma de la structure SLG/Mo / CIGS / ETLs / AZO/Al utilisée dans cette étude est illustré sur la figure II.1. Dans cette configuration, le substrat en verre (SLG) recouvre la cellule solaire. Le Molybdène (Mo) agit en tant que contact arrière, le CIGS joue le rôle de la couche active de type p, tandis que la couche tampon présente différentes couches de transport d'électrons (ETLs) de type n, qui sont utilisées dans notre étude. La couche ZnO:Al (AZO) dopée à Aluminium est utilisée comme couche fenêtre. Enfin, l'aluminium (Al) est utilisé comme contact avant du dispositif. Les caractéristiques électriques, géométriques et optiques des matériaux de toutes les couches employées dans la fabrication de la cellule solaire simulée ont été extraites des références bibliographiques [6-22] et sont répertoriées dans le tableau II.1.

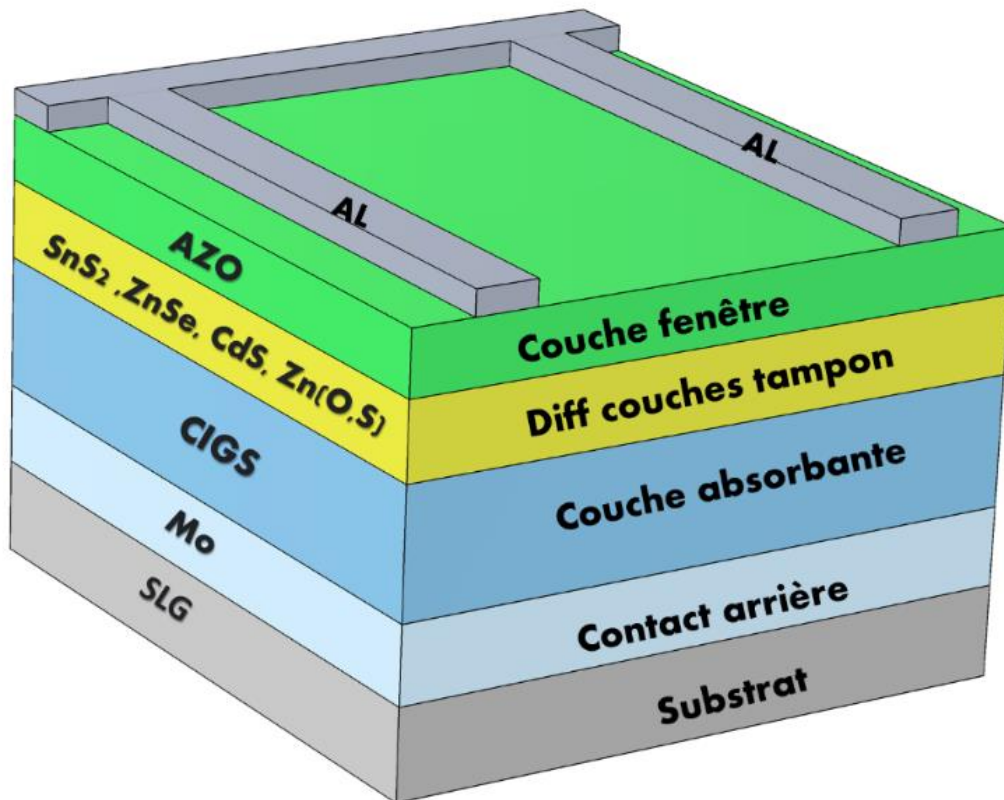


Figure II. 1 : Cellule solaire CIGS avec différentes couches tampon.

Tableau II. 1 : Paramètres physiques de la cellule CIGS avec différents tampons

Propriétés des matériaux	Unités	CIGS (p)	CdS (n)	SnS ₂ (n)	ZnSe (n)	Zn (O, S) (n)	AZO (n)
Epaisseur	μm	0.5-2 /	0.05 [9]	0.05 [12]	0.05 [14]	0.05 [16]	0.06 [18]
Energie de gap E _g	eV	1.18 [6]	2.4 [10]	1.85 [12]	2.9 [14]	3.2 [17]	3.4 [19]
Affinité électronique χ	eV	4.26 [6]	3.98 [10]	4.26 [12]	4.09 [14]	3.86 [17]	4.5 [20]
Permittivité relative ε	-	13.6 [7]	10 [9]	17.7 [12]	10 [14]	9 [17]	9 [21]
Densité d'états effective dans la BC N _c	cm ⁻³	2.2×10 ¹⁸ [7]	2.2×10 ¹⁸ [10]	7.32×10 ¹⁸ [12]	2.2×10 ¹⁸ [14]	1.8×10 ¹⁹ [17]	2.2×10 ¹⁸ [21]
Densité d'états effective dans la BV N _v	cm ⁻³	1.8×10 ¹⁹ [7]	1.8×10 ¹⁹ [10]	1.8×10 ¹⁹ [12]	1.8×10 ¹⁹ [14]	2.4×10 ¹⁸ [17]	1.8×10 ¹⁹ [21]
Vitesse thermique V _{thn} / V _{thp}	cm/s	1×10 ⁷ [7]	1×10 ⁷ [10]	1×10 ⁷ [12]	1×10 ⁷ [14]	1×10 ⁷ [17]	1×10 ⁷ [21]
Electron mobility μ _n	cm ² /V s	100 [7]	1×10 ² [9]	50 [12]	2,5×10 ¹ [14]	1×10 ² [17]	100 [21]
Hole mobility μ _p	cm ² /V s	25 [7]	2.5×10 ¹ [9]	25 [12]	1×10 ² [14]	2,5×10 ¹ [17]	25 [21]
Densité de dopage N _D	cm ⁻³	0	1×10 ¹⁸ [11]	9.85×10 ¹⁸ [12]	1×10 ¹⁸ [14]	1×10 ¹⁸ [17]	1×10 ¹⁸ [21]
Densité de dopage N _A	cm ⁻³	2×10 ¹⁷ [8]	0	0	0	0	0
Densité de défauts N _t	cm ⁻³	1×10 ¹⁴ [7]	1×10 ¹⁷ [9]	1×10 ¹⁶ [13]	1×10 ¹⁶ [15]	1×10 ¹⁶ [13]	3×10 ¹⁶ [22]

Dans nos simulations, nous avons pris en considération une température ambiante de 300 K, une intensité lumineuse de 1000 W/m² et un spectre global de masse d'air de 1.5 G.

II.3. Etude comparative de divers couches tampon :

Nous allons faire une étude comparative des effets engendrés par différentes ETLs à savoir : Sulfure de Cadmium (CdS), le Sulfde d'Etain (SnS₂), Séléniure de Zinc (ZnSe) et le Sulfure d'Oxyde de Zinc Zn (O, S)) sur les performances globales de la cellule photovoltaïque. Notre travail s'est focalisé sur l'effet de l'épaisseur de la couche active CIGS, sur les performances des cellule photovoltaïque (courant de court-circuit,

tension en circuit ouvert, facteur de forme et rendement de conversion, notés respectivement J_{sc} , V_{oc} , FF et PCE). L'objectif fondamental consiste à réduire au minimum les pertes et à optimiser l'épaisseur en vue d'atteindre un rendement maximal.

II.3.1. Effet de l'épaisseur de la couche absorbante CIGS :

Nous avons pris différentes épaisseurs de la couche CIGS qui ont été modifiées de 0.1 μm à 2 μm , principalement pour des raisons économiques visant à minimiser l'utilisation de matériau CIGS et ainsi réduire les coûts de production de la cellule solaire. Tant dis que tous les autres paramètres de chaque couche tampon sont maintenus constants. La figure II.2 montre la variation des paramètres des cellules solaires étudiées.

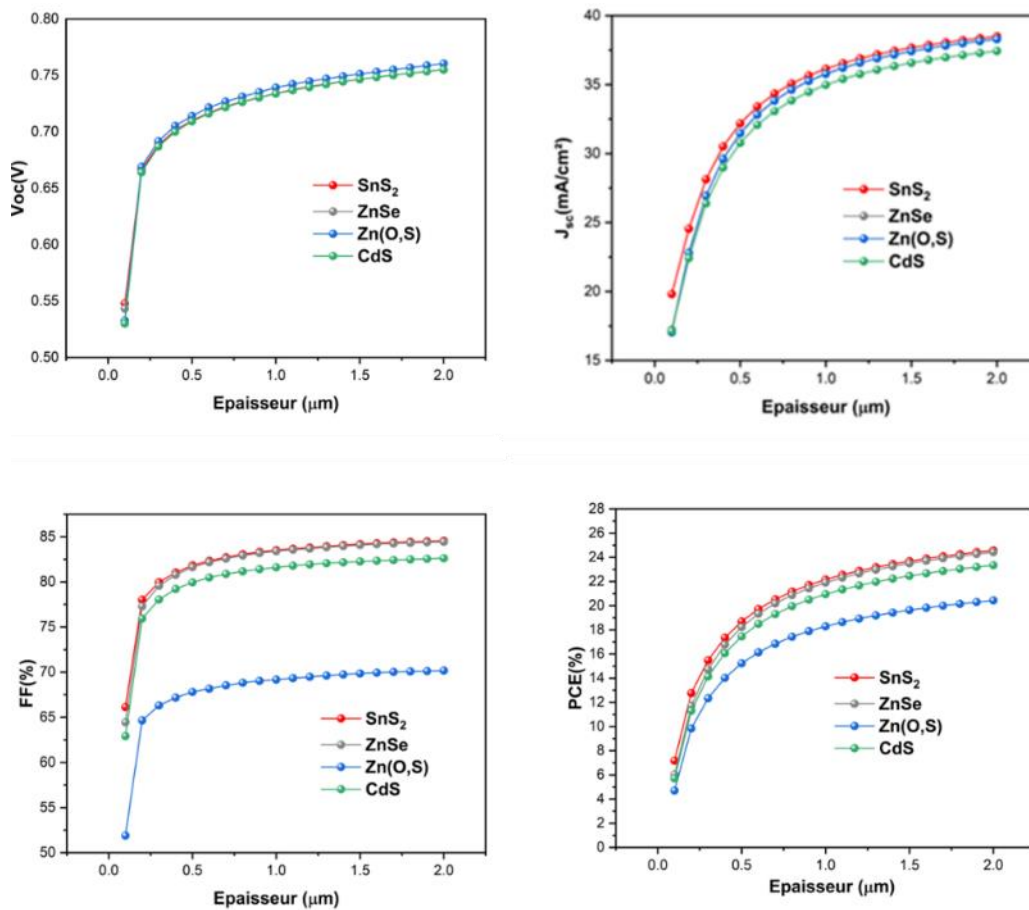


Figure II. 2 : Impact de l'épaisseur de la couche absorbante avec différentes couches tampon sur les performances de la cellule.

Pour les quatre matériaux que nous avons étudiés, il est remarquable que l'augmentation de l'épaisseur de la couche active de 0.1 μm jusqu'à 2 μm engendre des changements significatifs dans les performances du dispositif. Plus spécifiquement

nous avons observé une augmentation notable de la tension en circuit ouvert, passant de 0.53 à 0.76 V pour la plupart des tampons. Parallèlement, les valeurs du courant de court-circuit augmentent également. Plus précisément, pour différentes couches tampon à savoir SnS₂, ZnSe, Zn (O, S) et CdS, les augmentations respectives sont de 19.81 à 38.59 mA/cm², 17.23 à 38.31 mA/cm², 17.03 à 38.29 mA/cm² et 17.13 à 37.43 mA/cm².

Il est intéressant de noter que ce n'est pas seulement la tension et le courant qui sont affectés. Les paramètres du facteur de forme (FF) et de l'efficacité énergétique (PCE) suivent également cette tendance à mesure que l'épaisseur augmente, mais ces valeurs se stabilisent légèrement après avoir atteint une épaisseur de 1.5 µm. Pour les quatre types de tampons SnS₂, ZnSe, Zn (O, S) et CdS, le facteur de forme augmente de manière significative : de 66.14 à 84.18 %, de 64.45 à 84.07 %, de 51.89 à 69.85 % et de 62.93 à 82.26 % respectivement. De même, l'efficacité de conversion photovoltaïque (PCE) connaît des augmentations notables : de 7.18 à 23.67 %, de 6.03 à 23.50 %, de 4.07 à 19.63 % et de 5.71 à 22.46 % pour les différentes couches tampon SnS₂, ZnSe, Zn (O, S) et CdS respectivement.

Selon nos résultats, il est évident que l'épaisseur de la couche absorbante joue un rôle crucial dans le processus d'absorption de photons. La valeur optimale pour cette épaisseur a été déterminée à 1.5 µm. Cependant, il est important de noter que l'amélioration du facteur de forme et de l'efficacité de conversion d'énergie présente une saturation au-delà de cette épaisseur. Pour mener une analyse comparative approfondie de l'impact des différentes couches tampon sur les performances de notre cellule photovoltaïque, notre attention est dirigée vers les mécanismes de génération et de recombinaison observés au sein des structures suivantes : CIGS/SnS₂/AZO, CIGS/ZnSe/AZO, CIGS/CdS/AZO et CIGS/Zn (O, S) /AZO, comme illustré sur la figure II.3 et la figure II.4 respectivement.

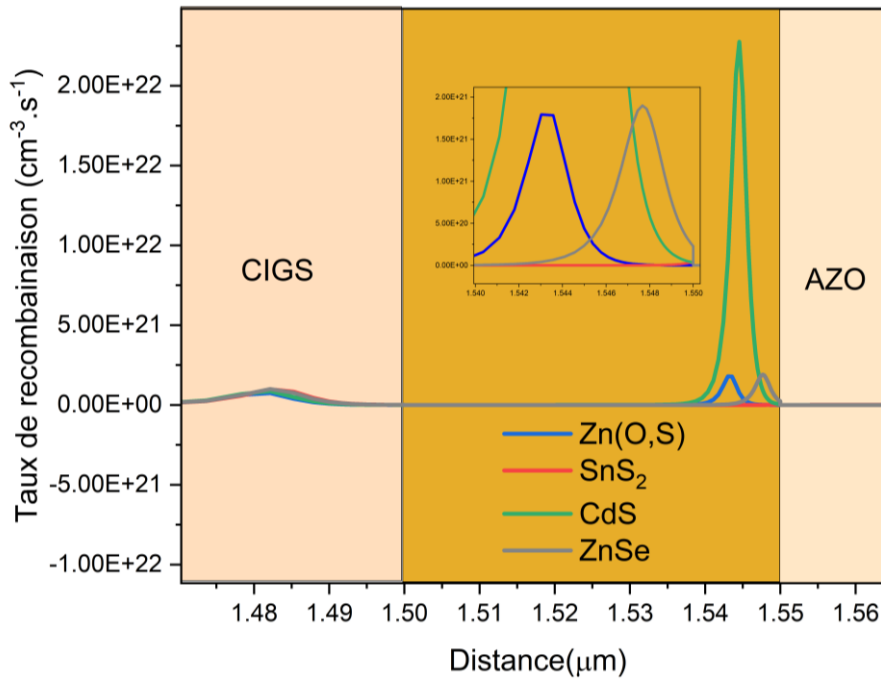


Figure II. 3 : Variation du taux de recombinaison pour divers ETLs (Zn (O, S), SnS₂, CdS, ZnSe).

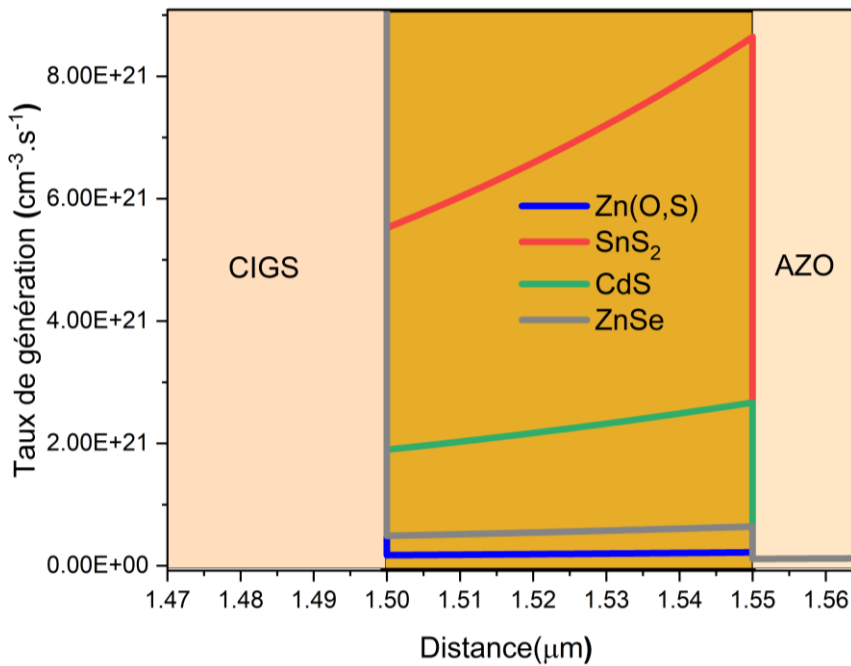


Figure II. 4 : Variation du taux de génération pour divers ETLs (Zn (O, S), SnS₂, CdS, ZnSe)

Il est essentiel de souligner que, malgré la couche tampon SnS₂ présente un taux de génération élevé, son rendement de conversion est le plus important, atteignant 23,67 % par rapport aux trois autres couches ETLs, grâce à son faible taux de recombinaison. Cependant, il convient de noter que pour tous les autres émetteurs, surtout le Zn (O, S), il y a peu de génération dans ces couches, ce qui est bien car les photons ne sont pas

absorbés, mais leur rendement est faible comparé à celui du SnS₂ en raison du taux élevé de recombinaison, ce qui détériore les performances globales de la cellule solaire.

II.3.2. Différents diagrammes de bande de la cellule CIGS

Les performances du TFSC (Thin Film SolarCell) sont sensiblement influencées par la sélectivité de la Couche de Transport d'Électrons (ETL), qui est principalement caractérisée par ses propriétés énergétiques et de transport. Ces propriétés englobent notamment l'alignement des bandes électroniques. Cependant, en utilisant des Matériaux de Transport d'Électrons (ETMs) présentant des bonnes propriétés, il est possible de réaliser une réduction significative des phénomènes de recombinaison interfaciale. Un alignement approprié des bandes à l'interface ETL/Absorbeur peut induire un ajustement adéquat des niveaux d'énergie de bande. [23 ,24] Le décalage de la bande de conduction (CBO) joue un rôle important dans la détermination de l'efficacité de la cellule dans laquelle le CBO est défini par l'équation suivante [24] :

$$CBO = \Delta E_C = \chi_{Absorbeur} - \chi_{ETL} \quad (II-1)$$

Où $\chi_{Absorbeur}$ et χ_{ETL} représentent l'affinité électronique de la couche absorbante et de la couche ETL, respectivement. Afin d'améliorer notre compréhension, nous allons présenter sur la figure II. 5 une série de diagrammes de bande d'énergie, illustrant les différentes couches ETLs : verre/Mo/(CIGS)/ (Zn (O, S), CdS, ZnSe, SnS₂) /ZnO/Al

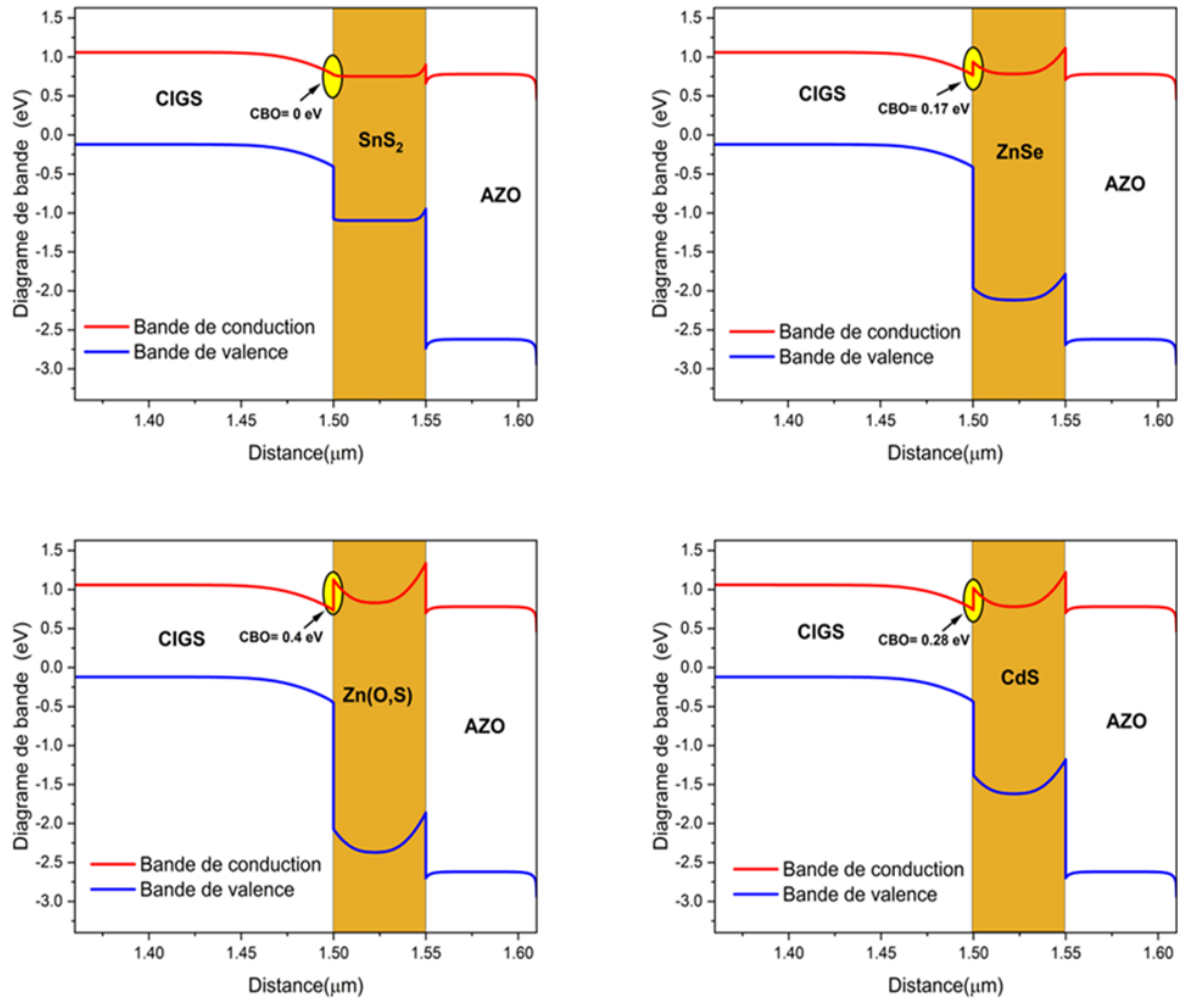


Figure II. 5 : Différents diagramme de bande d'énergie pour divers ETLs (Zn (O, S), SnS₂, CdS, ZnSe)

Notamment, nous avons observé que le décalage de la bande de conduction (CBO) en forme de pic pour laquelle le CBO est positif (Spike-like band) ainsi qu'il est croissant selon la séquence ZnSe (+0.17) → CdS (+0.28) → Zn (O, S) (+0.4). De plus, il est bien connu qu'un décalage de bande élevé en forme de pic, ce qui représente un CBO supérieur à environ 0.3 eV empêcher le transport des porteurs à travers l'interface de manière destructive [25]. L'accumulation d'électrons à l'hétérojonction est responsable d'une recombinaison intensive des porteurs de charge au niveau de la jonction PN. Cette recombinaison est amplifiée par les faibles gradients de potentiel observés dans cette région spécifique. Cependant, le décalage de bande au niveau de l'interface SnS₂/CIGS à hétérojonction présente un CBO nul (Flat band) qui est un cas possible et se traduit par une condition de bande plate. La présence quasi négligeable de la barrière énergétique au niveau du CBO facilite le déplacement des électrons photoexcités vers l'autre couche [26]. Généralement, il a été rapporté qu'une bande plate

ou une petite bande en forme de pointe est plus avantageux dans les TFSCs [27]. L'analyse du taux de recombinaison pour les quatre ETLs indique clairement une réduction significative de ce taux pour le cas de SnS₂. Cette diminution se traduit par une efficacité de conversion photoélectrique (PCE) plus élevée, atteignant 23.68 %. En conséquence, pour cette conception particulière, opter pour SnS₂ comme matériau de transport d'électrons (ETM) se révèle être le choix le plus optimal.

II.4. Etude comparative de divers couches BSFs :

II.4.1. Intérêt d'une couche BSF

Les performances d'une cellule photovoltaïque sont déterminées par trois éléments : la génération de charges, la dissociation des excitons et la collecte des porteurs de charges générés, mais la recombinaison de la surface arrière et la recombinaison de l'interface de contact semi-conducteur (CIGS)/métal (Mo) limitent la collecte des porteurs, réduisant ainsi l'efficacité de la cellule solaire et les performances globales du dispositif [38]. Un métal de contact arrière approprié avec une fonction de travail élevée est nécessaire pour améliorer l'efficacité de la cellule. Comme la plupart des métaux n'ont pas de travail de sortie suffisant, une barrière Schottky est créée entre l'électrode métallique Mo et l'interface de notre couche CIGS. Cette barrière Schottky peut avoir un impact significatif sur les caractéristiques courant-tension (I-V) d'une cellule solaire CIGS, principalement en limitant le transport des trous. C'est pourquoi un meilleur métal avec un travail de sortie élevée est nécessaire pour créer un contact ohmique avec la couche active du CIGS. Pour surmonter cette barrière, une stratégie connue consiste à minimiser la hauteur de la barrière ou à modérer sa largeur en dopant fortement une couche supplémentaire du champ de la surface arrière (BSF) avec un matériau approprié entre la couche active et le contact arrière métallique [39]. Il a été démontré que le BSF peut jouer un rôle crucial dans la réduction de la recombinaison de la surface arrière en créant une force sur la face arrière fortement dopée de la structure pour pousser les porteurs minoritaires vers la zone de déplétion, ce qui passive la surface arrière et réduit la recombinaison arrière du dispositif solaire, ce qui conduit à l'amélioration des propriétés électriques, le coût de fabrication du dispositif pouvant être réduit grâce à ce phénomène en diminuant l'épaisseur de la couche absorbante et en améliorant l'efficacité de la cellule solaire [6,40].

II.4.2. Présentation de la cellule SnS₂/CIGS/BSF.

Vu l'intérêt de la couche BSF, nous examinerons, la même cellule où nous utiliserons le SnS₂ en qualité de couche tampon et nous introduisons une couche de champs de surface arrière (BSFs) entre la couche CIGS et le molybdène et cela en utilisant différents matériaux. Notre but est de réaliser une étude comparative de ces diverses couches HTLs : Diséléniure de Molybdène (MoSe₂), Diséléniure de Cuivre et d'Indium (CuInSe₂) et le Monosulfure d'Étain (SnS) sur les performances globales du dispositif photovoltaïque. Le schéma de la cellule solaire avec différents BSFs est présenté sur la figure II.6.

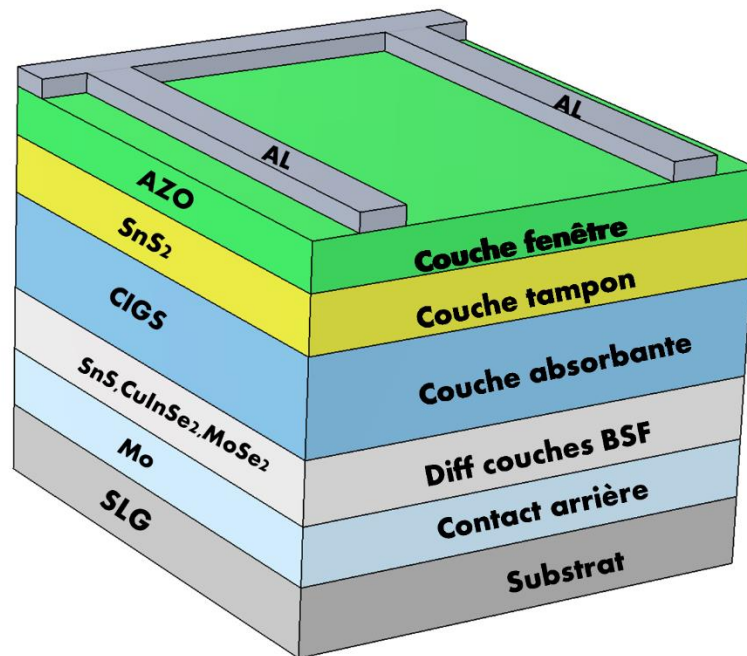


Figure II. 6 : Cellule solaire CIGS avec différents BSF

Les paramètres physiques nécessaires à la simulation numérique sont extraits des références scientifiques suivantes : [6-8,12,13,18-22,41-54]. Les valeurs sont résumées dans le tableau II.2. Notre étude se concentre spécifiquement sur l'influence de l'épaisseur de la couche active de CIGS sur les paramètres physiques de la cellule étudiée, incluant le courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement global (PCE).

Tableau II. 2 : Paramètres physiques de la cellule étudiée avec différents BSF

Propriétés des matériaux	Unités	SnS (p ⁺)	CuInSe ₂ (p ⁺)	MoSe ₂ (p ⁺)	CIGS (p)	SnS ₂ (n)	AZO (n)
Epaisseur	μm	0.03 [41]	0.03 [44]	0.03 [48]	0.5-2 /	0.05 [12]	0.06 [18]
Energie de gap E_g	eV	1.3 [42]	1.04 [45]	1.35 [49]	1.18 [6]	1.85 [12]	3.4 [19]
Affinité électronique χ	eV	4.2 [42]	4.3 [45]	4.32 [50]	4.26 [6]	4.26 [12]	4.5 [20]
Permittivité relative ε	-	12.5 [42]	13.6 [46]	7.29 [51]	13.6 [7]	17.7 [12]	9 [21]
Densité d'états effective dans la BC N_c	cm ⁻³	1×10 ¹⁹ [42]	2.2×10 ¹⁸ [46]	2.2×10 ¹⁸ [52]	2.2×10 ¹⁸ [7]	7.32×10 ¹⁸ [12]	2.2×10 ¹⁸ [21]
Densité d'états effective dans la BV N_v	cm ⁻³	4.13×10 ¹⁹ [42]	1.8×10 ¹⁹ [46]	1.8×10 ¹⁹ [52]	1.8×10 ¹⁹ [7]	1.8×10 ¹⁹ [12]	1.8×10 ¹⁹ [21]
Vitesse thermique V_{thn}/ V_{thp}	cm/s	1×10 ⁷ [42]	1×10 ⁷ [47]	1×10 ⁷ [51]	1×10 ⁷ [7]	1×10 ⁷ [12]	1×10 ⁷ [21]
Electron mobility μ_n	cm ² /Vs	25 [42]	100 [45]	25 [51]	100 [7]	50 [12]	100 [21]
Hole mobility μ_p	cm ² /Vs	10 [42]	25 [45]	100 [51]	25 [7]	25 [12]	25 [21]
Densité de dopage N_D	cm ⁻³	0	0	0	0	9.85×10 ¹⁸ [12]	1×10 ¹⁸ [21]
Densité de dopage N_A	cm ⁻³	3×10 ¹⁸ [42]	1×10 ²⁰ [46]	1×10 ¹⁸ [53]	2×10 ¹⁷ [8]	0	0
Densité de défauts N_t	cm ⁻³	1×10 ¹⁴ [43]	1×10 ¹⁴ [46]	1×10 ¹⁵ [54]	1×10 ¹⁴ [7]	1×10 ¹⁶ [13]	3×10 ¹⁶ [22]

L'objectif fondamental de cette investigation est de sélectionner le BSF optimal. Cette sélection vise deux objectifs majeurs : premièrement, améliorer l'efficacité énergétique globale de la cellule solaire. Deuxièmement, réduire l'épaisseur nécessaire de la couche active CIGS, ce qui pourrait avoir des répercussions positives sur la toxicité globale du dispositif.

II.4.3. Effet de l'épaisseur de la couche CIGS avec divers BSF

Nous avons modifié l'épaisseur de la couche absorbante dans un intervalle de 0.1 μm à 1.5 μm tout en maintenant les autres paramètres constants. Les variations des caractéristiques de la cellule solaire étudiée sont illustrées sur la figure II.7.

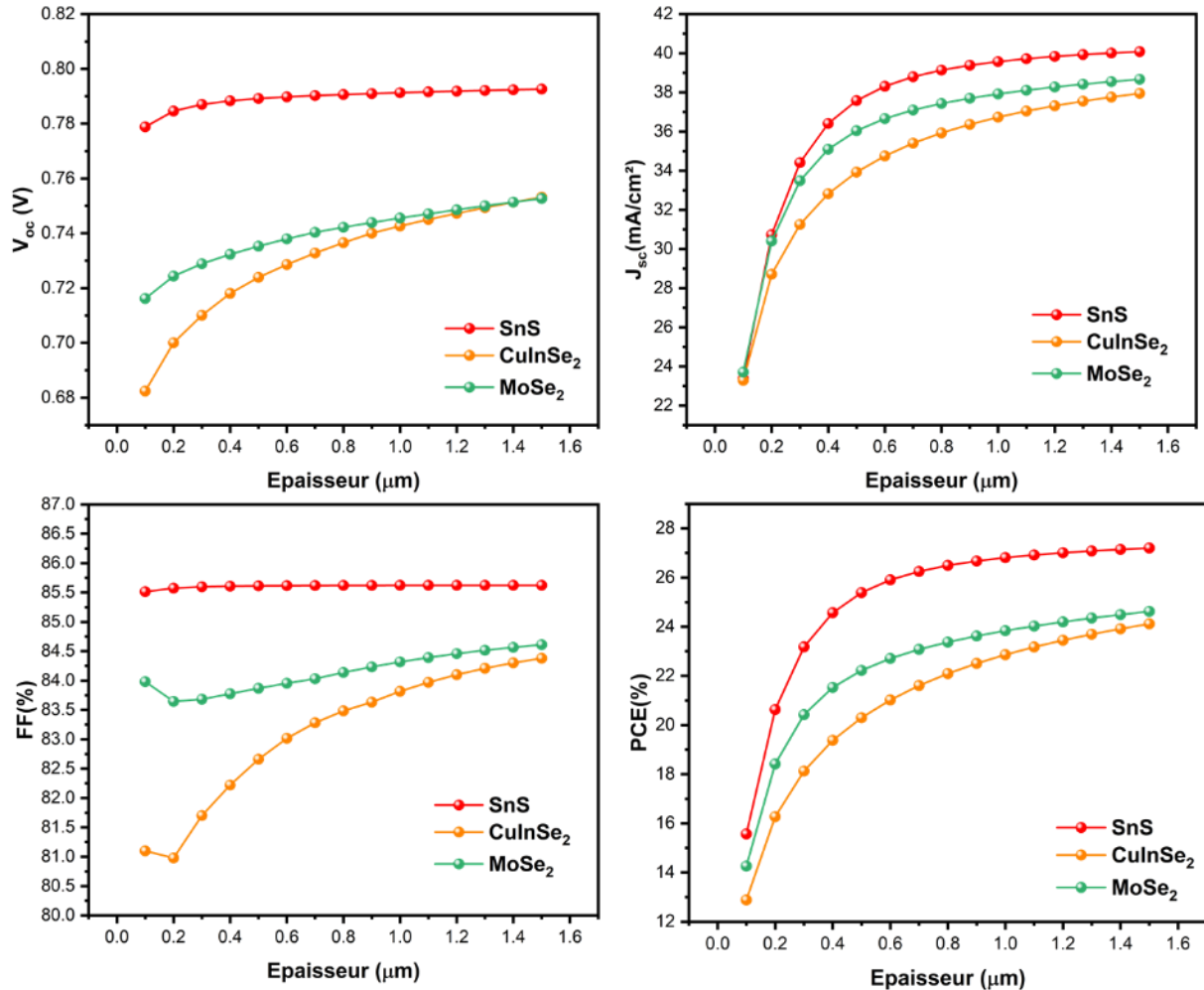


Figure II. 7 : Impact de l'épaisseur de la couche absorbante avec différents BSFs sur les performances de la cellule.

Nous avons mené des investigations sur quatre matériaux HTLs, et il est particulièrement remarquable de constater que l'augmentation de l'épaisseur de la couche active jusqu'à 1.5 μm entraîne des modifications significatives dans les performances du dispositif. Plus précisément, nous avons observé une augmentation notable du courant de court-circuit, passant de 23.28 à 37.95 mA/cm² pour la couche HTL(CuInSe₂) et de 23.71 à 38.66mA/cm² pour la couche HTL (MoSe₂). En parallèle, la couche HTL(SnS), quant à elle, démontre un J_{sc} qui s'accroît de 23.37 mA/cm² à

39.57 mA/cm² lorsque l'épaisseur de la couche active passe de 0.1 μm à 1 μm. Au-delà de cette épaisseur, ce paramètre se maintient presque constant jusqu'à 1.5 μm.

Simultanément, les valeurs de l'efficacité énergétique suivent une tendance croissante lorsque l'épaisseur de la couche CIGS passe de 0.1 à 1.5 μm. Pour les couches BSFs (CuInSe₂ et MoSe₂), les augmentations respectives s'établissent de 12.88 à 24.12 % et 14.26 à 24.62 %. En ce qui concerne le matériau HTM(SnS), l'efficacité s'améliore de 15.57 à 26.81 %. Cette évolution se produit après que l'épaisseur de la couche active a été accrue de 0.1 à 1 μm, et demeure stable au-delà de cette épaisseur jusqu'à 1.5 μm.

Il est remarquable de constater que les paramètres du facteur de forme (FF) et de la tension à circuit ouvert (V_{oc}) pour HTL(SnS) restent pratiquement stables à mesure que l'épaisseur augmente de 0.1 μm à 1.5 μm. Dans ce cas, le FF atteint environ 85.62 % et le V_{oc} environ 0.79 V pour une épaisseur de couche de CIGS de 1 μm. En ce qui concerne les deux autres HTMs (CuInSe₂ et MoSe₂), le FF diminue légèrement pour CuInSe₂ de 83.42 à 82.58 % et pour MoSe₂ de 83.98 à 83.65 %. Ensuite, il augmente progressivement jusqu'à 84.51 % et 84.61 % respectivement à 1.5 μm d'épaisseur. De plus, la tension évolue de 0.68 à 0.75 V pour CuInSe₂ et de 0.72 à 0.75 V pour MoSe₂ lorsque l'épaisseur passe de 0.1 μm à 1.5 μm.

D'après nos résultats, nous constatons que l'incorporation d'une couche BSF a un impact significatif sur l'épaisseur de la couche absorbante, jouant ainsi un rôle critique dans l'optimisation du rendement de conversion. Nous avons identifié la valeur optimale de cette épaisseur à 1.5 μm pour les deux couches HTLs (CuInSe₂ et MoSe₂) examinées. De manière spécifique, pour le matériau HTM (SnS), nos observations révèlent que l'épaisseur optimale de la couche active est de 1 μm, cette valeur offre des avantages notables pour le matériau CIGS. Cette démarche d'optimisation s'avère particulièrement pertinente dans le contexte de la réduction des quantités de gallium et d'indium. Des observations significativement différentes ont été notées en ce qui concerne les performances photovoltaïques du BSF(SnS), par rapport aux deux autres matériaux BSFs.

Afin de réaliser une étude comparative approfondie de l'influence des diverses couches de transport de trous HTLs sur les performances de notre cellule photovoltaïque. Nous dirigeons notre attention vers l'étude de champs électrique

observés au sein des structures suivantes : Mo/SnS/CIGS, Mo/CuInSe₂/CIGS et Mo/MoSe₂/CIGS. Cette configuration est clairement illustrée sur la figure II. 8

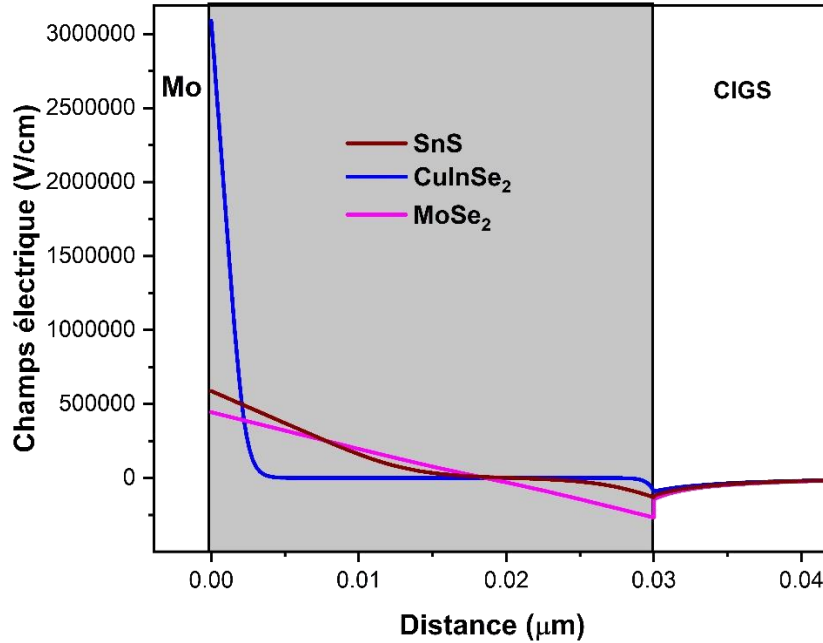


Figure II. 8 : Variation du champ électrique pour divers HTLs (CuInSe₂, SnS et MoSe₂)

Il est impératif de noter que le BSF (CuInSe₂) présente un champ élevé au niveau de l'interface arrière Mo/SnS en raison de son fort dopage. Cependant, à l'interface CuInSe₂/CIGS, le champ est faible, ce qui diminue son efficacité énergétique, évaluée à 24,12 %. En ce qui concerne le BSF (MoSe₂), il présente un champ électrique élevé à l'interface MoSe₂/CIGS, mais à l'interface arrière Mo/MoSe₂, il est faible, ce qui diminue son rendement à 24,62 %. Le BSF (SnS) présente un rendement atteignant la valeur la plus remarquable de 26,81 % grâce au champ électrique important au niveau des deux interfaces Mo/SnS et SnS/CIGS.

II.4.4. Diagramme de bande de la cellule CIGS avec divers BSF

Pour assurer une extraction et un transport efficaces des trous à l'interface entre différentes couches de transport de trous (HTLs) et l'absorbeur, il est impératif d'aligner correctement les niveaux d'énergie de la bande de valence (VB) de la couche HTL avec ceux de la couche active. En l'absence d'un alignement adéquat, deux configurations distinctes apparaissent à l'interface HTL/CIGS : L'une de ces configurations, présente

une forme en falaise avec un décalage vers le bas (-VBO), tandis que l'autre prend la forme d'un pic avec un décalage vers le haut (+VBO)[55,56]. La configuration en forme de falaise se développe lorsque le niveau d'énergie du VB du HTL est supérieur à celui de la couche absorbante, tandis que la configuration en forme de pic se forme lorsque le niveau d'énergie du VB du HTL est inférieur à celui de la couche active. Le décalage du VBO entre la couche absorbante et la couche HTL peut être déterminé par l'équation suivante [55,56] :

$$VBO = \Delta E_V = \chi_{HTL} - \chi_{Absorbteur} + E_{g_{HTL}} - E_{g_{Absorbteur}} \quad (II-2)$$

Dans le contexte de cette étude, les symboles χ_{HTL} et $\chi_{Absorbteur}$ désignent les affinités électroniques caractéristiques de la couche de transport d'électrons (HTL) et de la couche absorbante, respectivement. Par ailleurs, les paramètres $E_{g_{HTL}}$ et $E_{g_{Absorbteur}}$ correspondent aux valeurs d'énergie de bande interdite de la couche HTL et de la couche CIGS, respectivement. Dans le but d'enrichir notre compréhension, nous présenterons sur la figure II.9 une succession de trois diagrammes de bandes d'énergie. Ces diagrammes illustrent la structure à hétérojonction CIGS/SnS₂ avec divers matériaux de transport de trous (HTMs), à savoir : Mo/ (CuInSe₂, SnS et MoSe₂) /CIGS

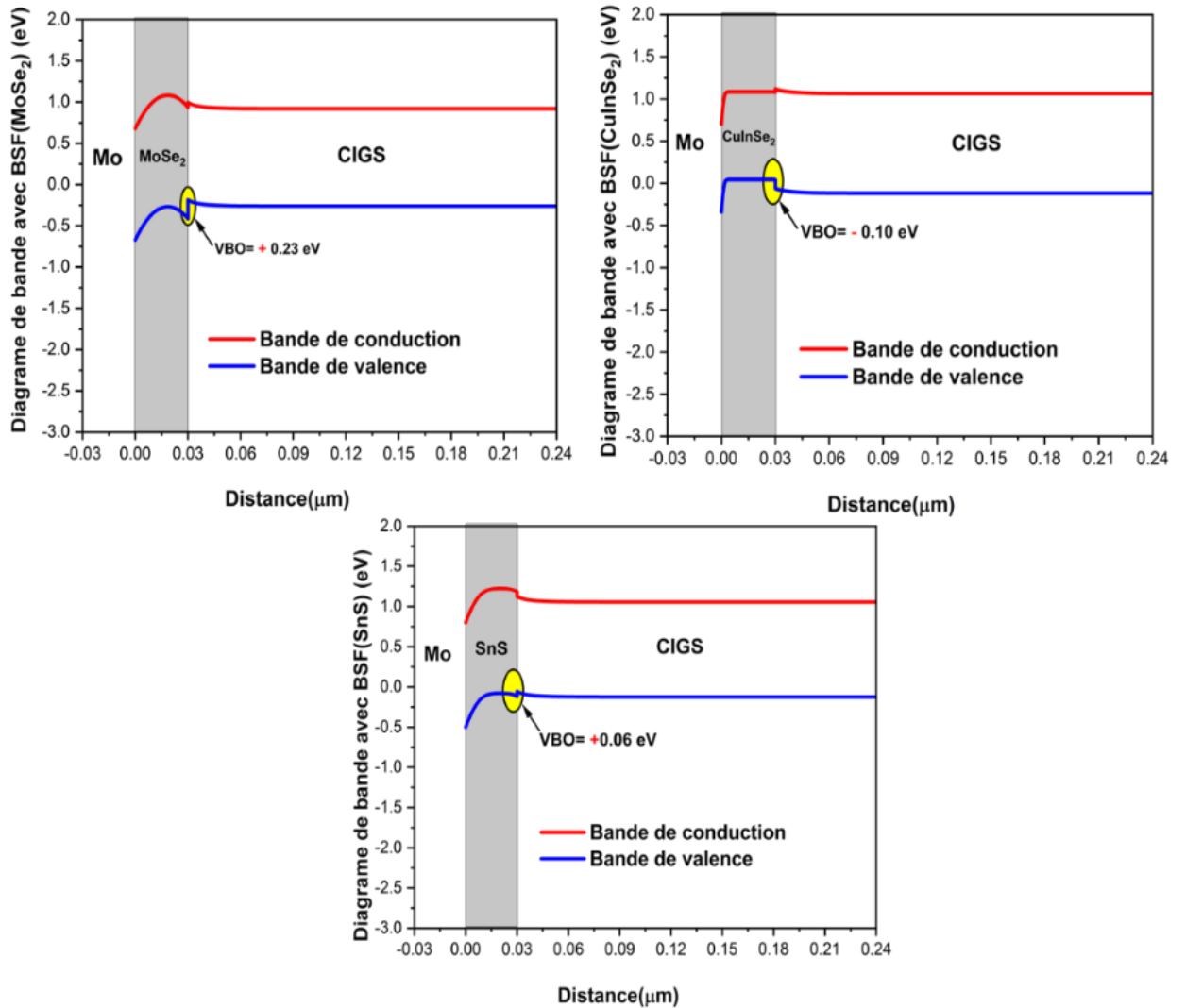


Figure II. 9 : Différents diagramme de bande d'énergie pour divers HTMs(CuInSe₂, SnS et MoSe₂)

Nos investigations ont révélé des caractéristiques significatives liées au décalage de la bande de valence prenant la forme d'un pic caractérisé par une valeur positive (Spike-like band) de la couche MoSe₂ (VBO=+0.23) et une valeur négative (Cliff-like band) de la couche CuInSe₂ (VBO=-0.1eV)

Au niveau de l'interface MoSe₂/CIGS, les particules de trous rencontrent une barrière significative, ce qui entrave leur mouvement vers la gauche, c'est-à-dire vers la couche BSF (MoSe₂). A l'interface CuInSe₂/CIGS, la formation d'une petite forme de falaise améliore l'accumulation des porteurs de charge photogénérés à l'interface HTL/absorbeur [55,57]

En revanche, les particules de trous au niveau de l'interface BSF (SnS)/CIGS peuvent facilement franchir cette barrière sans une consommation d'énergie

additionnelle. Ceci est attribué à la présence d'une fine barrière de VBO (+0.06 eV) qui améliore l'efficacité énergétique. Cette amélioration se traduit par une augmentation de la tension en circuit ouvert (V_{OC}), de la densité de courant en court-circuit (J_{sc}) et du facteur de forme (FF)

II.5. Conclusion

Dans le cadre de cette étude de recherche, nous avons employé une cellule photovoltaïque basée sur le matériau CIGS pour réaliser des simulations numériques. L'optimisation de cette cellule a été exécutée au moyen du logiciel SCAPS-1D. Notre étude principale visait à modéliser les paramètres de sortie d'une cellule solaire CIGS dans le but de déterminer leurs valeurs optimales. Pour se faire, nous avons examiné l'effet de la variation de l'épaisseur de la couche absorbante ainsi que l'influence de la température de fonctionnement sur les caractéristiques I-V de la cellule.

Notre première investigation s'est concentrée sur l'évaluation de l'impact des quatre couches d'ETLs, à savoir CdS, ZnSe, SnS₂ et Zn (O, S). Cette étude nous a permis d'optimiser la performance de la cellule solaire en utilisant différentes structures, à savoir Mo/CIGS/Zn(O,S)/AZO, Mo/CIGS/CdS/AZO, Mo/CIGS/ZnSe/AZO et Mo/CIGS/SnS₂/AZO, atteignant des rendements respectifs de 19.63% ,22.46% , 23.50 et 23.67%. Nous avons trouvé que les quatre cellules ont atteint leur rendement optimal à une température de 300K, avec une épaisseur de la couche absorbante de 1.5 μm . Notre choix s'est porté sur la couche tampon du sulfure d'étain (IV) (SnS₂), ce qui a conduit à la meilleure performance photovoltaïque, ainsi qu'une capacité de génération élevée. De plus, il présente un taux de recombinaison pratiquement inexistant en comparaison avec les trois autres couches de transport d'électron (ETLs) examinées.

Par la suite, nous avons également étudié l'impact de l'incorporation de différentes couches HTLs, à savoir CuInSe₂, MoSe₂ et SnS, dans la structure Mo/HTLs/CIGS/SnS₂/AZO. Les valeurs obtenues pour le rendement de conversion étaient respectivement de 24.12%,24.62% et 26.81%. Nous avons opté pour la couche BSF(SnS) en raison de son rendement énergétique supérieur, ainsi que pour sa faible épaisseur, qui s'élève à seulement de 1 μm dans la couche CIGS.

Notre constatation au cours de ce chapitre révèle un alignement favorable des bandes de la couche SnS₂ et SnS avec les autres couches de la cellule solaire, ce qui les

positionne comme des candidats idéaux pour être utilisés en tant que couches tampon et BSF. Ceci est principalement dû à leur décalage minimal de la bande de conduction (CBO) et de la bande de valence (VBO), qui approche les 0 eV. Cette caractéristique les rend particulièrement adaptés à la création d'une hétérojonction avec la couche absorbante CIGS, réduisant ainsi au minimum les pertes de porteurs photo-générés tout en améliorant le champ électrique et les performances photovoltaïques du dispositif. L'objectif de notre étude était de concevoir une configuration théorique optimale, visant à maximiser le rendement de conversion, en vue de poursuivre nos simulations dans le prochain chapitre. Nous avons utilisé le logiciel SCAPS-1D pour modéliser la cellule solaire à couche mince, avec une structure de SLG/Mo/SnS/CIGS/SnS₂/AZO/Al. Les résultats seront présentés et interprétés dans le chapitre suivant.

Références

- [1] F.-W. Liu, T.-M. Cheng, Y.-J. Chen, K.-C. Yueh, S.-Y. Tang, K. Wang, C.-L. Wu et al., High-yield recycling and recovery of copper, indium, and gallium from waste copper indium gallium selenide thin-film solar panels. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 241, 111691 (2022).
- [2] A.J.N. Oliveira, J.P. Teixeira, D. Ramos, P.A. Fernandes, and P.M.P. Salomé, Exploiting the Optical Limits of Thin-Film Solar Cells: A Review on Light Management Strategies in Cu (In, Ga) Se₂. *Adv. Photon. Res.* 3, 2100190 (2022).
- [3] J. Zikulnig, W. Mühleisen, P.J. Bolt, M. Simor, and M. De Biasio, Photoluminescence imaging for the in-line quality control of thin-film solar cells. *Solar* 2, 1-11 (2022).
- [4] A. Debot, V.B. Chu, D. Adeleye, J. Guillot, D. Arl, M. Melchiorre, and P.J. Dale, Inkjet-printed indium sulfide buffer layer for Cu (In, Ga)(S, Se)₂ thin film solar cells. *Thin Solid Films* 745, 139096 (2022).
- [5] M. Jamil, M. Amami, A. Ali, K. Mahmood, and N. Amin, Numerical modeling of AZTS as buffer layer in CZTS solar cells with back surface field for the improvement of cell performance. *Sol. Energy* 231, 41-46 (2022).
- [6] A.K. Patel, P.K. Rao, R. Mishra, and S.K. Soni, "Numerical study of a high-performance thin film CIGS solar cell with a-Si and MoTe₂ hole transport layer." *Optik* 243, 167498 (2021).
- [7] W. Liu, H. Li, B. Qiao, S. Zhao, Z. Xu, and D. Song, "Highly efficient CIGS solar cells based on a new CIGS bandgap gradient design characterized by numerical simulation." *Solar Energy* 233, 337-344 (2022).
- [8] M.K. Sobayel, M.S. Chowdhury, T. Hossain, H.I. Alkhamash, S. Islam, M. Shahiduzzaman, Md Akhtaruzzaman, K. Techato, and M.J. Rashid, "Efficiency enhancement of CIGS solar cell by cubic silicon carbide as prospective buffer layer." *Solar Energy* 224, 271-278 (2021).
- [9] Abdelkadir, A. A., & Sahal, M. Theoretical development of the CZTS thin-film solar cell by SCAPS-1D software based on experimental work. *Materials Science and Engineering: B*, 296, 116710 (2023).
- [10] Malani, R., Pansuriya, T., & Kheraj, V. A study on influence of potential defects and optimization of device structure for CuSbS₂ based thin film solar cell using SCAPS-1D simulator. *Optical Materials*, 133, 112910. (2022).
- [11] Kannan, P. K., & Anandkumar, M. A theoretical investigation to boost the efficiency of CZTS solar cells using SCAPS-1D. *Optik*, 288, 171214. (2023).
- [12] M. Haghghi, M. Minbashi, N. Taghavinia, D.-H. Kim, S.M. Mahdavi, and A.A. Kordbacheh, "A modeling study on utilizing SnS₂ as the buffer layer of CZT(S,Se) solar cells." *Solar Energy* 167, 165-171 (2018).
- [13] T. Pansuriya, R. Malani, and V. Kheraj, "Investigations on the effect of buffer layer on CMTS based thin film solar cell using SCAPS 1-D." *Opt. Mater.* 126, 112150 (2022).
- [14] Et-taya, L., Benami, A., & Ouslimane, T. Study of CZTSSe-based solar cells with different ETMs by SCAPS. *Sustainability*, 14(3), 1916 (2022).
- [15] Saadat, M., Amiri, O., & Mahmood, P. H. Analysis and performance assessment of CuSbS₂-based thin-film solar cells with different buffer layers. *The European Physical Journal Plus*, 137(5), 582 (2022).
- [16] Sabbah, H., Arayro, J., & Mezher, R. Numerical simulation and optimization of highly stable and efficient lead-free perovskite FA_{1-x}Cs_xSnI₃-based solar cells using SCAPS. *Materials*, 15(14), 4761 (2022).
- [17] Malani, R., Pansuriya, T., & Kheraj, V. A study on influence of potential defects and optimization of device structure for CuSbS₂ based thin film solar cell using SCAPS-1D simulator. *Optical Materials*, 133, 112910 (2022).
- [18] H. Aissani, A. Helmaoui, and H. Moughli, "Numerical modeling of graded band-gap cigs solar cell for high efficiency." *Int. J. Appl. Eng. Res.* 12, 227-232 (2017).
- [19] K.R. Ngoy, A.K. Singh, T.-C. Jen, and A.M. Ali, "Numerical analysis of thin film Cu₂InGaSe₄ solar cells design." *Solar Energy* 225, 53-59 (2021).

- [20] N.E.I. Boukortt, S. Patanè, M. Adouane, and R. AlHammadi, "Numerical optimization of ultrathin CIGS solar cells with rear surface passivation." *Solar Energy* 220, 590-597 (2021).
- [21] T. AlZoubi, A. Moghrabi, M. Moustafa, and S. Yasin, Efficiency boost of CZTS solar cells based on double-absorber architecture: Device modeling and analysis. *Solar Energy* 225, 44-52 (2021).
- [22] V.C. Karade, J.S. Jang, D. Kumbhar, M. Rao, P.S. Pawar, S. Kim, K.S. Gour, et al., Combating open circuit voltage loss in Sb₂Se₃ solar cell with an application of SnS as a back surface field layer. *Solar Energy* 233, 435-445 (2022).
- [23] Jahandardoost, M., Walkons, C., & Bansal, S. Degradation behavior of CIGS solar Cells: A parametric analysis. *Solar Energy*, 260, 61-70 (2023).
- [24] Sobayel, K., Shahinuzzaman, M., Amin, N., Karim, M. R., Dar, M. A., Gul, R., ... & Akhtaruzzaman, M. Efficiency enhancement of CIGS solar cell by WS₂ as window layer through numerical modelling tool. *Solar Energy*, 207, 479-485 (2020).
- [25] Scheer, R., & Schock, H. W. *Chalcogenide photovoltaics: physics, technologies, and thin film devices*. John Wiley & Sons (2011).
- [26] Salem, M. S., Shaker, A., Othman, M. S., Al-Bagawia, A. H., Fedawy, M., & Aleid, G. M. Numerical analysis and design of high performance HTL-free antimony sulfide solar cells by SCAPS-1D. *Optical Materials*, 123, 111880 (2022).
- [27] Alanazi, T. I., & El Sabbagh, M. Proposal and Design of Flexible All-Polymer/CIGS Tandem Solar Cell. *Polymers*, 15(8), 1823(2023).
- [28] Theelen, M., Liakopoulou, A., Hans, V., Daume, F., Steijvers, H., Barreau, N., ... & Zeman, M. Determination of the temperature dependency of the electrical parameters of CIGS solar cells. *Journal of Renewable and Sustainable Energy*, 9(2) (2017).
- [29] Dong, J., Liu, Y., Wang, Z., & Zhang, Y. Boosting VOC of antimony chalcogenide solar cells: A review on interfaces and defects. *Nano Select*, 2(10), 1818-1848 (2021).
- [30] Rahmoune, A., & Babahani, O. Numerical analysis of Al/Gr/ETL/MoS₂/Sb₂S₃/Ni solar cell using non-toxic In₂S₃/SnS₂/ZnSe electron transport layer. *Optik*, 283, 170875(2023).
- [31] Or, A. B., & Appelbaum, J. Dependence of multi-junction solar cells parameters on concentration and temperature. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 130, 234-240(2014).
- [32] Dwivedi, D. K. Modeling of CZTSSe solar photovoltaic cell for window layer optimization. *Optik*, 222, 165407(2020).
- [33] Ghorbani, T., Zahedifar, M., Moradi, M., & Ghanbari, E. Influence of affinity, band gap and ambient temperature on the efficiency of CIGS solar cells. *Optik*, 223, 165541 (2020).
- [34] Li, J., Liu, X., Liu, W., Wu, L., Ge, B., Lin, S., ... & Zhang, Y. Restraining the Band Fluctuation of CBD-Zn (O, S) Layer : Modifying the Hetero-Junction Interface for High Performance Cu₂ZnSnSe₄ Solar Cells with Cd-Free Buffer Layer. *Solar Rrl*, 1(10), 1700075(2017).
- [35] Seo, H. K., Ok, E. A., Kim, W. M., Park, J. K., Seong, T. Y., Lee, D. W., ... & Jeong, J. H. Electrical and optical characterization of the influence of chemical bath deposition time and temperature on CdS/Cu (In, Ga) Se₂ junction properties in Cu (In, Ga) Se₂ solar cells. *Thin Solid Films*, 546, 289-293. (2013).
- [36] Xin, P. *Alternative buffer layer development in Cu (In, Ga) Se 2 thin film solar cells*. University of Delaware (2017).
- [37] Markov, V. F., Korotcenkov, G., & Maskaeva, L. N. Thin Films of Wide Band Gap II-VI Semiconductor Compounds: Features of Preparation. In *Handbook of II-VI Semiconductor-Based Sensors and Radiation Detectors: Volume 1, Materials and Technology* (pp. 233-275). Cham: Springer International Publishing. (2023).
- [38] M.S. Rana, M.M. Islam, and M. Julkarnain, Enhancement in efficiency of CZTS solar cell by using CZTSe BSF layer. *Solar Energy* 226, 272 (2021).
- [39] Barman, B., & Kalita, P. K. Influence of back surface field layer on enhancing the efficiency of CIGS solar cell. *Solar Energy*, 216, 329-337. (2021).
- [40] N. Mufti, T. Amrillah, A. Taufiq, M. Diantoro, and H. Nur, "Review of CIGS-based solar cells manufacturing by structural engineering." *Solar Energy* 207, 1146-1157 (2020)
- [41] Omrani, M. K., Minbashi, M., Memarian, N., & Kim, D. H. Improve the performance of CZTSSe solar cells by applying a SnS BSF layer. *Solid-State Electronics*, 141, 50-57(2018).

- [42] B.C. Mohanty, Improving performance of Cu₂ZnSnS₄ solar cell via back contact interface engineering. *Solar Energy* 230, 986-995 (2021).
- [43] E. Oublal, M. Sahal, and A.A. Abdelkadir, New theoretical analysis of a novel hetero-junction SnS/CdS solar cell with homo-junction P-P+ in the rear face-numerical approach. *Curr. Appl. Phys.* 39, 230-238 (2022).
- [44] Prasher, D., Chandel, T., & Rajaram, P. Electrochemical growth and studies of CuInSe₂ thin films. *Materials Research Express*, 1(2), 026401 (2014).
- [45] Ying, M., Wen, J., & Zhao, Y. Numerical simulation of CuInSe₂ solar cells using wxAMPS software. *Chinese Journal of Physics*, 76, 24-34. (2022).
- [46] Boukourt, N. E. I., Patanè, S., & Abdurraheem, Y. M. Numerical investigation of CIGS thin-film solar cells. *Solar Energy*, 204, 440-447(2020).
- [47] Kumar, R., & Chand, F. Performance enhancement in MA0. 7FA0. 3PbI₃ based perovskite solar cell by gradient doping. *Optik*, 274, 170558. (2023).
- [48] Sylla, A., Siaka, T., & Vilcot, J. P. Theoretical analysis of the effect of the interfacial mose₂ layer in cigs-based solar cells. *Open Journal of Modelling and Simulation*, 9(04), 339-350 (2021).
- [49] TEYOU NGOUPO, A., & NDJAKA, J. M. B. Performance enhancement of Sb₂Se₃-based solar cell with hybrid buffer layer and MoSe₂ as a hole transport material using simulator device. *Discover Mechanical Engineering*, 1(1), 5. (2022).
- [50] Za'abar, F. I., Yusoff, Y., Mohamed, H., Abdullah, S. F., Mahmood Zuhdi, A. W., Amin, N., ... & Wan Abdullah, W. S. A numerical investigation on the combined effects of MoSe₂ interface layer and graded bandgap absorber in CIGS thin film solar cells. *Coatings*, 11(8), 930 (2021).
- [51] Ramírez-Velasco, S., González-Castillo, J. R., Ayala-Mató, F., Hernández-Calderón, V., Jiménez-Olarte, D., & Vigil-Galán, O. Back contact modification in Sb₂Se₃ solar cells: The effect of a thin layer of MoSe₂. *Thin Solid Films*, 751, 139227. (2022).
- [52] Li, W., Li, W., Feng, Y., & Yang, C. Numerical analysis of the back interface for high efficiency wide band gap chalcopyrite solar cells. *Solar Energy*, 180, 207-215. (2019).
- [53] AlZoubi, T., Al-Gharram, M., & Moustafa, M. Insights into the impact of defect states and temperature on the performance of kesterite-based thin-film solar cells. *Optik*, 264, 169442. (2022).
- [54] Moustafa, M., Al Zoubi, T., & Yasin, S. Numerical analysis of the role of p-MoSe₂ interfacial layer in CZTSe thin-film solar cells using SCAPS simulation. *Optik*, 247, 167885. (2021).
- [55] Gharibshahian, I., Orouji, A. A., & Sharbati, S. Effectiveness of band discontinuities between CIGS absorber and copper-based hole transport layer in limiting recombination at the back contact. *Materials Today Communications*, 33, 104220. (2022).
- [56] Minemoto, T., & Murata, M. Theoretical analysis on effect of band offsets in perovskite solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 133, 8-14. (2015)
- [57] Yadav, N., Roy, P., & Khare, A. An investigation of defects, band-offset, and Schottky barrier height for boosting the performance of formamidinium mixed cation mixed halide-based perovskite solar cell: Theoretical approach. *Materials Science and Engineering : B*, 293, 116458. (2023).

III. Chapitre :

Optimisation de la cellule inorganique à base de CIGS avec ETL(SnS₂) et HTL(SnS)

III.1. Introduction :

Dans ce chapitre, nous nous pencherons sur l'optimisation par simulation numérique de la cellule solaire à couche mince CIGS de type P, dont la structure à hétérojonction choisie est défini comme suit : SLG/Mo/SnS/CIGS/SnS₂/AZO/Al. Notre approche consistera à suivre plusieurs étapes. Pour commencer, nous entamerons l'optimisation de la couche HTL (SnS) sélectionnée. Ensuite, nous évaluons les performances de la couche CIGS en présence et en absence de la couche BSF (SnS). Nous poursuivons notre étude en optimisant la couche tampon choisie ETL(SnS₂)

Au cours de notre étude, nous examinons l'effet des divers paramètres essentielles tels que l'épaisseur, la densité de dopage et l'énergie de bande interdite sur les performances photovoltaïques (V_{oc} , J_{sc} , FF et η) de notre cellule solaire. Cette démarche a pour objectif d'optimiser les performances de notre cellule solaire CIGS en ajustant minutieusement les paramètres de chaque couche, dans le but ultime d'atteindre un rendement supérieur à 26.81 %, une valeur déjà obtenue dans le chapitre précédent (chapitre II) de notre recherche antérieure avec une épaisseur de 1 μ m de la couche absorbante CIGS. En outre, nous effectuons une analyse détaillée sur les caractéristiques J(V), le rendement quantique, le champ électrique, ainsi que le taux de recombinaison et de transport. Ces paramètres jouent un rôle essentiel dans la détermination des performances de la cellule que nous étudions.

III.2. Présentation de la structure SLG/Mo/SnS/CIGS/SnS₂/AZO/Al

La figure III.1 présente la configuration de la cellule solaire examinée, c'est-à-dire SLG/Mo/SnS/CIGS/SnS₂/AZO/Al. Les paramètres physiques d'entrée nécessaires à la simulation numérique ont été tirés des références scientifiques citées [1-3] [4,5] [6-10] [11-13]. Ces paramètres sont regroupés dans le tableau III.1 pour une représentation claire.

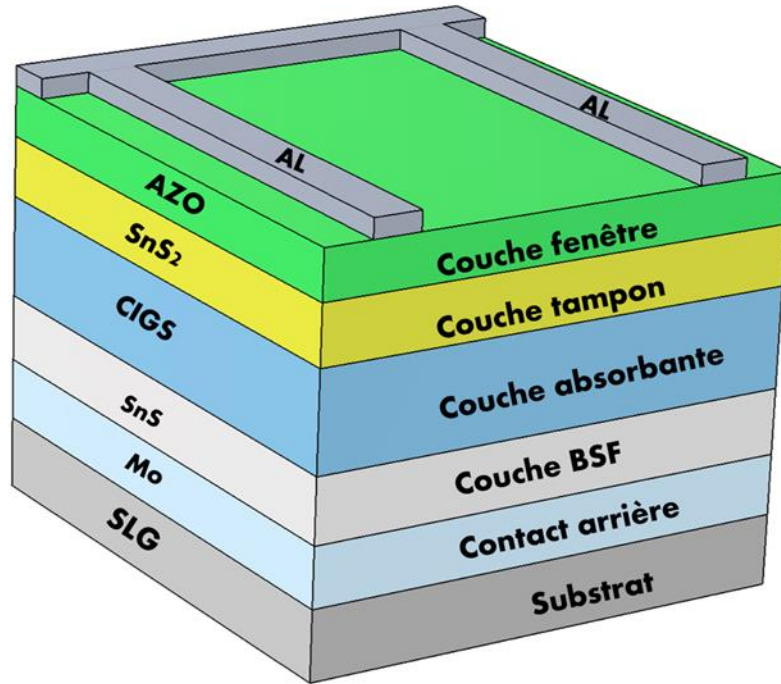


Figure III. 1 : Schéma du dispositif solaire proposé à base de CIGS.

Tableau III. 1 : Paramètres d'entrée SCAPS pour la configuration initiale de l'appareil à 300K

Propriétés des matériaux	Unités	CIGS (p)	SnS ₂ (n)	AZO (n)	SnS (p ⁺)
Epaisseur	μm	1	0.05[4]	0.06[6]	0.03[11]
Energie de gap E _g	eV	1.18[1]	1.85[4]	3.4[7]	1.3[12]
Affinité électronique χ	eV	4.26[1]	4.26[4]	4.5 [8]	4.2 [12]
Permittivité relative ε	-	13.6 [2]	17.7 [4]	9 [9]	12.5 [12]
Densité d'états effective dans la BC N _c	cm ⁻³	2.2×10 ¹⁸ [2]	7.32×10 ¹⁸ [4]	2.2×10 ¹⁸ [9]	1×10 ¹⁹ [12]
Densité d'états effective dans la BV N _v	cm ⁻³	1.8×10 ¹⁹ [2]	1.8×10 ¹⁹ [4]	1.8×10 ¹⁹ [9]	4.13×10 ¹⁹ [12]
Vitesse thermique V _{thn} /V _{thp}	cm/s	1×10 ⁷ [2]	1×10 ⁷ [4]	1×10 ⁷ [9]	1×10 ⁷ [12]
Electron mobility μ _n	cm ² /Vs	100 [2]	50[4]	100 [9]	25 [12]
Hole mobility μ _p	cm ² /Vs	25 [2]	25[4]	25 [9]	10 [12]
Densité de dopage N _D	cm ⁻³	0	9.85×10 ¹⁸ [4]	1×10 ¹⁸ [9]	0
Densité de dopage N _A	cm ⁻³	2×10 ¹⁷ [3]	0	0	3×10 ¹⁸ [12]
Densité de défauts N _t	cm ⁻³	1×10 ¹⁴ [2]	1×10 ¹⁶ [5]	3×10 ¹⁶ [10]	1×10 ¹⁴ [13]

La quantité de courant circulant à travers le dispositif solaire Mo/SnS/CIGS/SnS₂/AZO est vérifiée par l'alignement de la bande interdite présenté sur la figure III.2. Une barrière Schottky est créée entre la couche absorbante et le contact Mo, qui a un travail de sortie du métal de $\Phi_m=5$ eV [14] supérieure à $E_g + \chi$ ($E_g + \chi < \Phi_m$) [15,16]. Où E_g est la bande interdite et χ indique l'affinité pour les électrons.

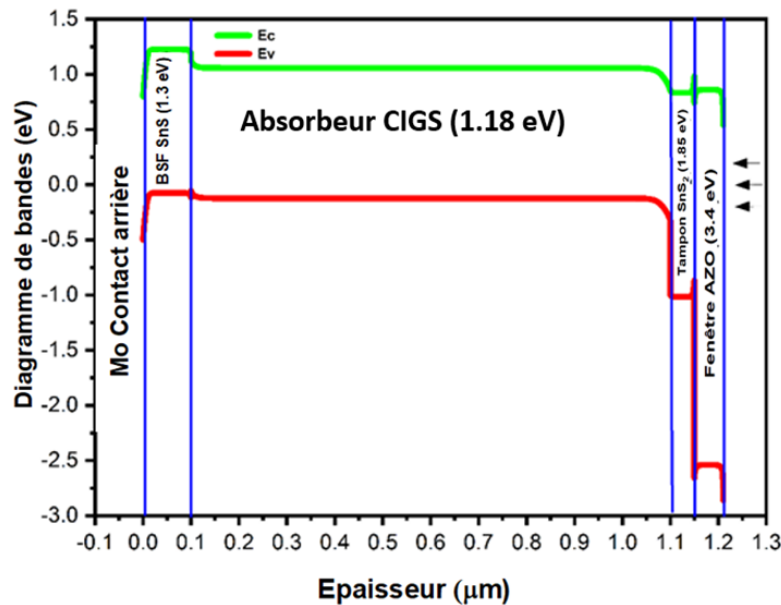


Figure III. 2 : Structure du diagramme de bande de la cellule solaire CIGS étudiée avec BSF.

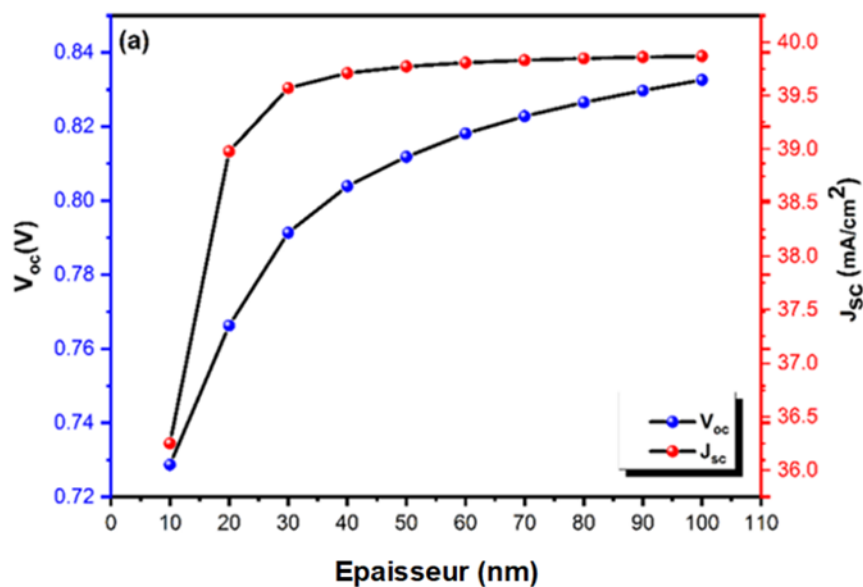
En général, l'électron est capturé lorsqu'il atteint la surface arrière Mo et ne peut pas contribuer au courant. L'existence de la couche BSF entre le CIGS et le Mo facilite le déplacement des électrons vers la couche tampon, favorisant ainsi leur contribution continue à l'effet photovoltaïque. La couche de SnS fournit les trous supplémentaires et réduit le taux de recombinaison de la surface arrière.

III.3. Optimisation de la couche BSF(SnS).

III.3.1. Effet de l'épaisseur de la couche de BSF(SnS) sur la performance des cellules CIGS.

Dans cette recherche d'optimisation, l'effet de la couche SnS à champ de surface arrière sur les performances de la cellule photovoltaïques CIGS a été étudié en faisant varier l'épaisseur de cette dernière de 10 à 100 nm. Parallèlement, en maintenant l'épaisseur de la couche CIGS constante (1 μ m) et la densité de dopage N_A ($3 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$)

3). Les résultats de V_{oc} , J_{sc} , FF et PCE sont illustrés sur la figure III.3. D'après les résultats, on remarque que lorsque l'épaisseur du BSF (SnS) augmente, le V_{oc} augmente de manière monotone de 0.73 à 0.80 V. D'autre part, J_{sc} (36.25 à 39.71 mA/cm²) et FF (83.50 to 85.78%) augmente de façon presque linéaire lorsque l'épaisseur passe de 10 à 40 nm. Le PCE suit presque la tendance du FF, passant de 22.06 à 27.38%. Les caractéristiques de la densité de courant-tension (J-V) et de l'efficacité quantique (QE) sont illustrées sur les figures III.4 et 5, respectivement. On constate que l'épaisseur de la couche BSF (SnS) a une forte influence sur ces courbes. Sur la figure III.4, le V_{oc} augmente de manière significative en fonction de l'épaisseur de la couche SnS-P⁺, puis se sature à des épaisseurs supérieures à 40 nm (0.04 μm). Un champ électrique est créé en raison de la formation d'une jonction P-P⁺ à l'interface entre le SnS-P⁺ et le CIGS-P qui se comporte comme une barrière de potentielle pour le transport des électrons vers la surface avant. La rétrodiffusion des électrons réduit le courant d'obscurité tout en augmentant le J_{sc} [17]. La largeur de 40 nm de la couche SnS-P⁺ permet d'obtenir une densité de courant de court-circuit de 39.7 mA/cm² et un rendement énergétique d'environ 27.38%. En outre, la figure III.5 montre une augmentation du rendement quantique externe.



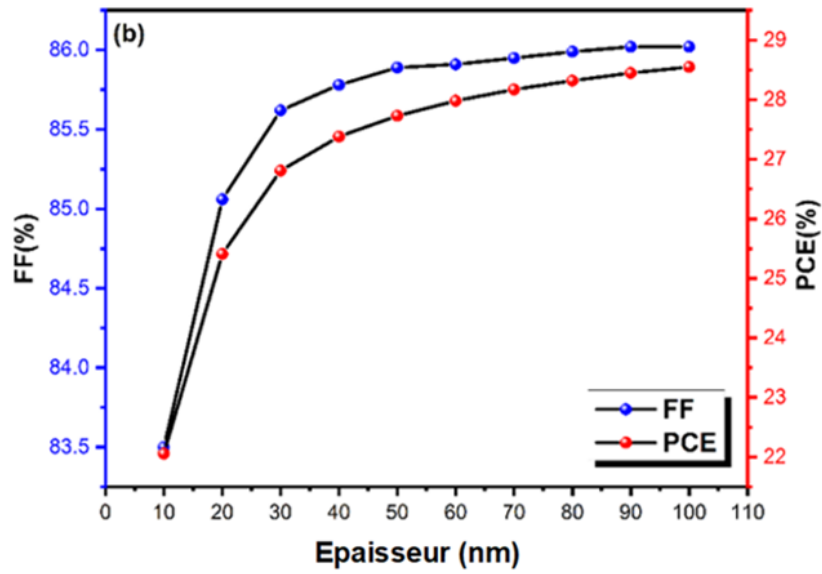


Figure III. 3 : Effet de l'épaisseur de la couche BSF (SnS) sur les performances du dispositif solaire. (a) Variation de V_{oc} et J_{sc} . (b) Variation de FF et PCE.

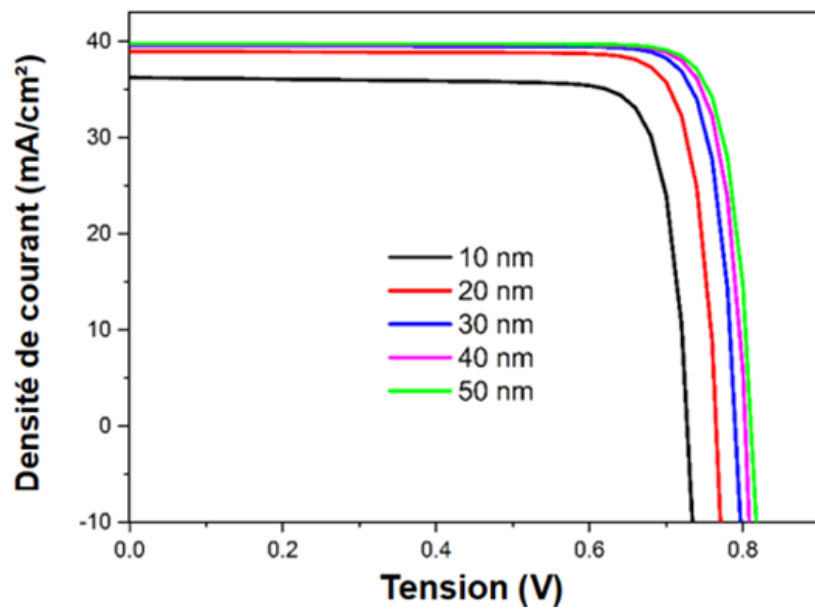


Figure III. 4 : Caractéristique J-V des cellules solaires à base de CIGS pour différentes épaisseurs de la couche BSF (SnS).

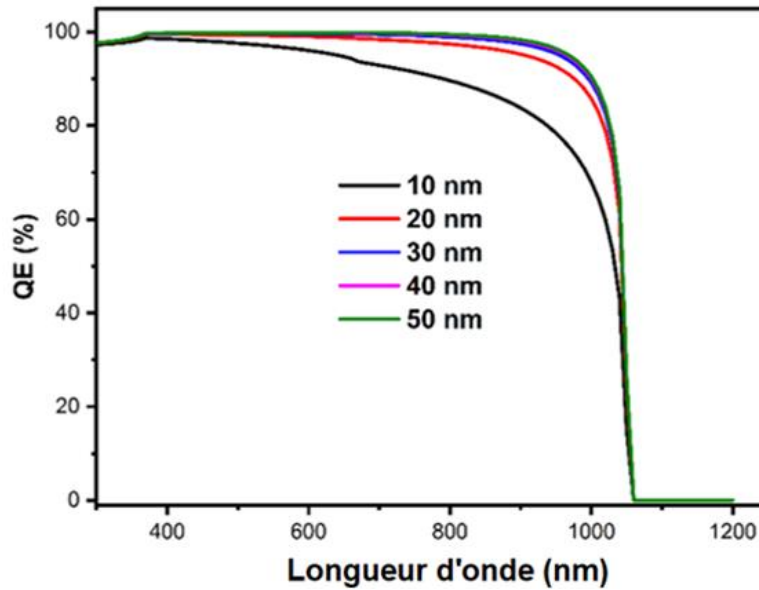


Figure III. 5 : Rendement quantique des cellules solaires à base de CIGS pour différentes épaisseurs de la couche BSF (SnS).

Les spectres obtenus dans la région des grandes longueurs d'onde (780-1100nm) montrent clairement l'absorption optique étendue au-delà de l'épaisseur de 20 nm. Par conséquent, une épaisseur de couche BSF de 40 nm est appropriée, avec un impact similaire sur la performance de la cellule.

III.3.2. Effet de la concentration de l'accepteur de la couche BSF (SnS) sur la performance de la cellule CIGS.

La couche BSF joue un rôle essentiel dans la collecte des porteurs photogénérés dans la couche active CIGS. La densité de dopage N_A du matériau BSF (SnS) passe de 3×10^{15} à $3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ à une épaisseur constante de 40 nm de la couche SnS-P⁺, comme le montre la figure III.6, nous observons que la densité de courant de court-circuit augmente de 39.71 à 39.91 mA/cm², FF de 85.78 à 86.10% et PCE de 27.38 à 29.66% lorsque la concentration de dopage de l'accepteur est augmentée de 3×10^{18} à $3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. La courbe J-V est illustrée pour différentes densités de dopage N_A sur la figure III.7. On remarque que le V_{OC} tend à augmenter de 0.80 to 0.86 V lorsque la concentration de dopage de SnS-P⁺ augmente de 3×10^{18} à $3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Nous observons également une légère augmentation de J_{SC} . Pour cette raison, nous avons choisi deux valeurs de densité d'accepteurs de la couche SnS-P⁺ en fonction du champ électrique, comme illustré sur la figure III.8. Nous pouvons observer pour les deux valeurs de densité que lorsque nous augmentons la concentration de porteurs à $3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, le champ électrique augmente près de l'interface arrière Mo/SnS. En conséquence, le

rendement quantique en fonction de la longueur d'onde pour différentes concentrations d'accepteurs de la couche BSF (SnS) est présentée sur la figure III.9.

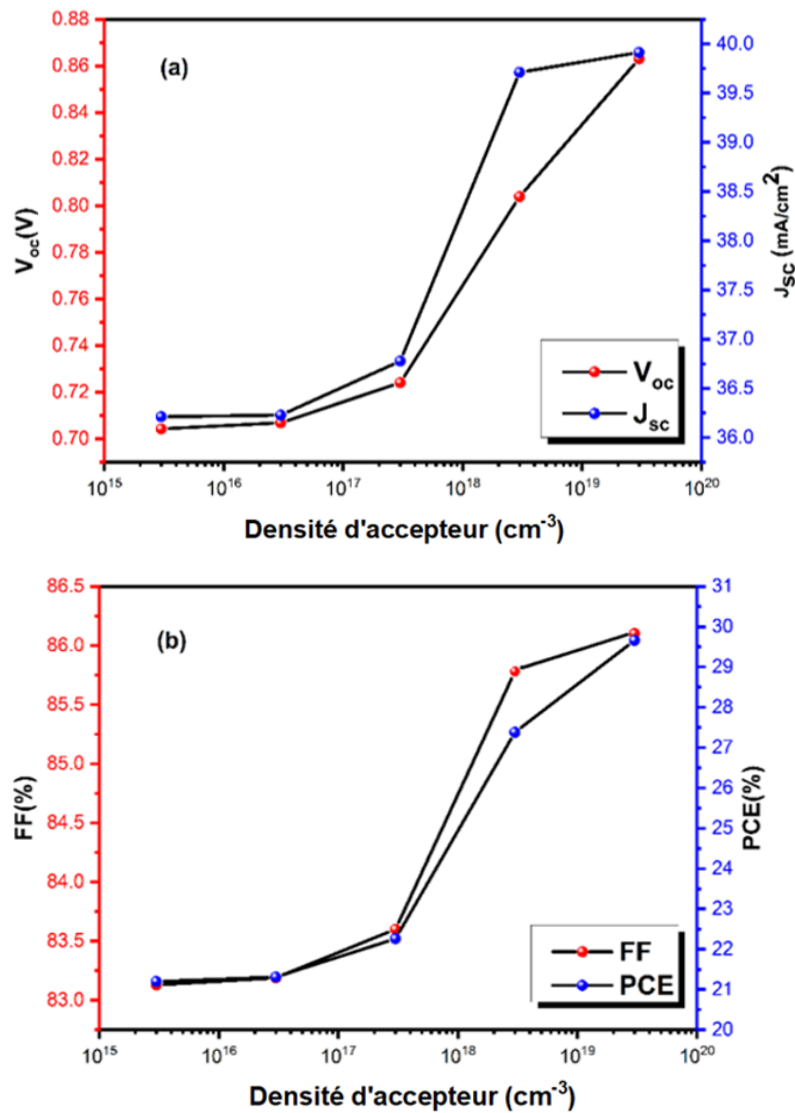


Figure III. 6 : Effet de la densité de l'accepteur BSF (SnS) sur la performance du dispositif solaire. (a) Variation de V_{oc} et J_{sc} . (b) Variation FF et PCE

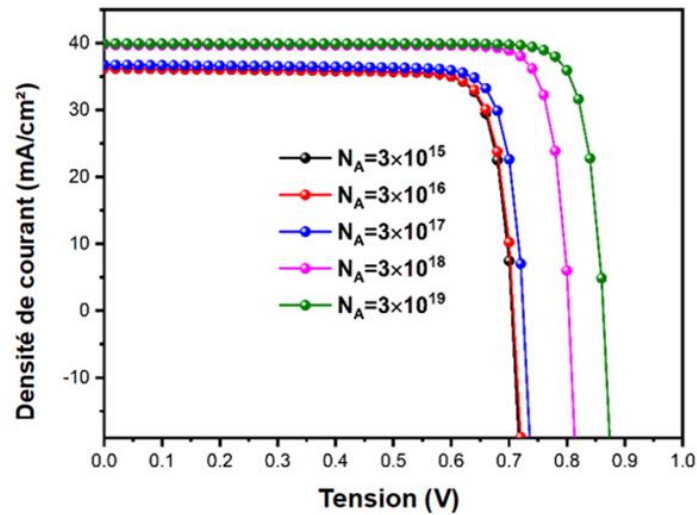


Figure III. 7 : Caractéristique J-V des cellules solaires à base de CIGS avec BSF (SnS) pour différentes densités d'accepteurs.

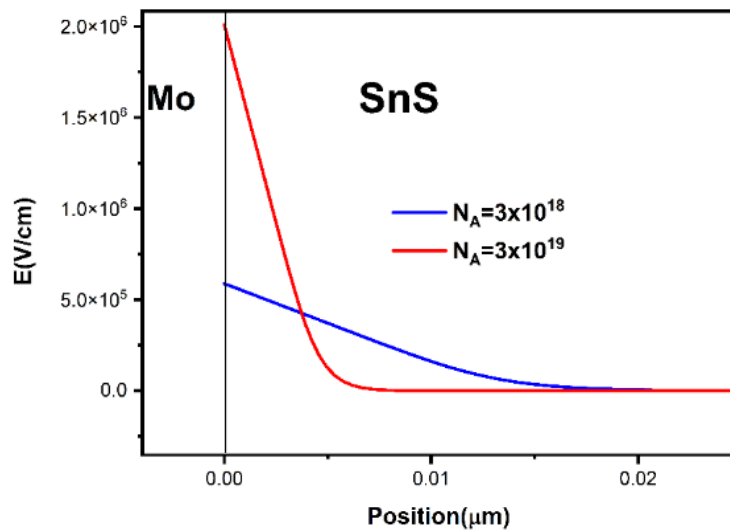


Figure III. 8 : Champ électrique pour une cellule solaire CIGS avec deux valeurs de densité d'accepteurs.

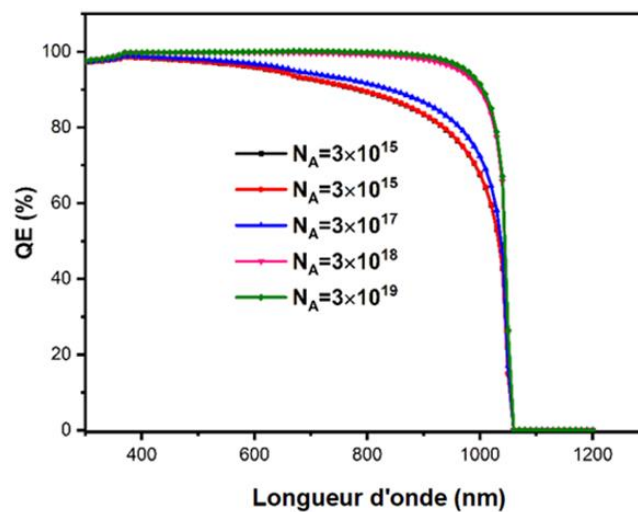
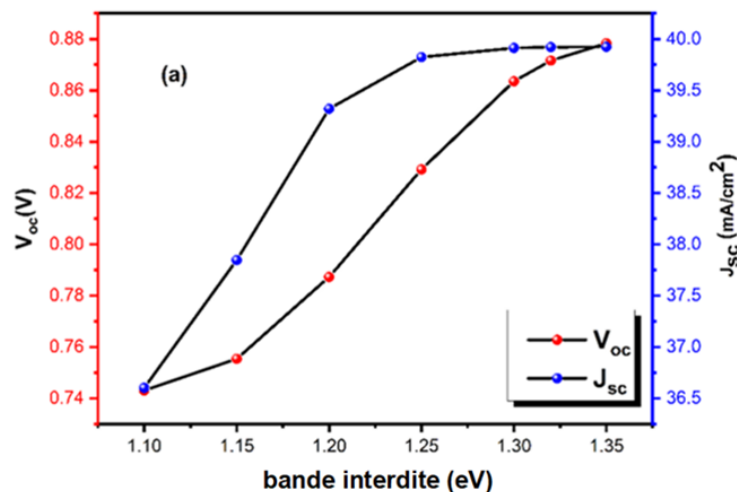


Figure III. 9 : Rendement quantique des cellules solaires à base de CIGS avec BSF (SnS) pour différentes densités d'accepteurs.

Il a été remarqué que le QE pour une valeur $N_{A(SnS)}$ plus élevée est supérieure pour les grandes longueurs d'onde. Une densité élevée d'accepteurs améliore le mécanisme de transfert d'électrons dans une cellule photovoltaïque [1,18]. Les performances optimales des cellules solaires CIGS ont été obtenues pour une concentration de porteur BSF (SnS) et une épaisseur de $3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ et 40 nm, respectivement.

III.3.3. Effet de l'énergie de gap de la couche BSF (SnS) sur les performances des cellules CIGS.

L'étape suivante consiste à optimiser la bande interdite de la couche de surface arrière SnS. La figure III.10 illustre la variation des paramètres V_{OC} , J_{SC} , FF, et PCE en fonction de l'énergie de gap pour une épaisseur de BSF (SnS) de 40 nm et de $N_{A(SnS)} = 3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Nous pouvons voir que la performance de la cellule est réduite pour un petit gap ($E_g=1.1 \text{ eV}$) et s'améliore ensuite lorsque l'énergie de gap augmente jusqu'à ce qu'elle atteigne une densité de courant de court-circuit de 39.92 mA/cm^2 et un courant de circuit ouvert de 0.87 V pour une énergie de gap de 1.35 eV . Cependant, pour une énergie de 1.32 eV , l'efficacité maximale est de 29.79% , suite à cela le PCE est presque constant, mais le cas est différent pour FF qui augmente jusqu'à $FF=86.12\%$ pour $E_g=1.3 \text{ eV}$ et diminue ensuite pour atteindre 84.34% pour $E_g= 1.35 \text{ eV}$.



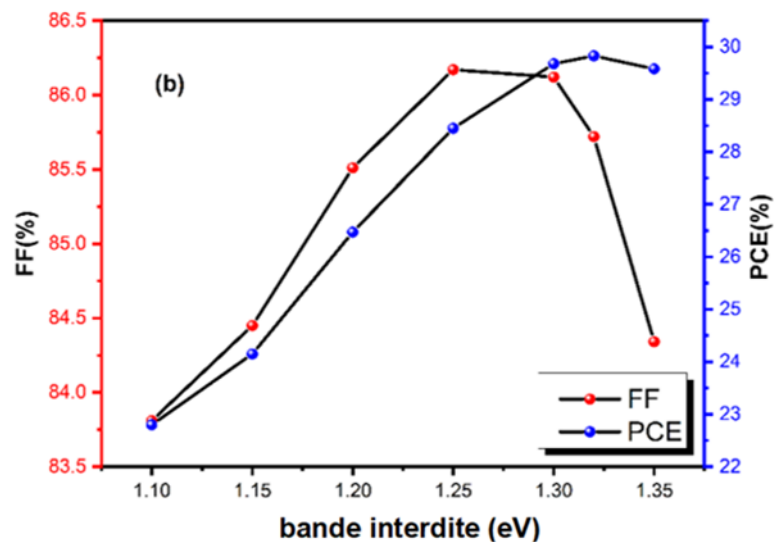


Figure III. 10 : Variation des performances du dispositif en fonction de l'énergie de l'énergie de gap de la couche BSF (SnS). (a) Voc et Jsc. (b) FF et PCE

Afin d'expliquer cela, la figure III.11 illustre le champ électrique généré au niveau du contact arrière entre SnS et Mo pour différents gaps d'énergie allant de 1.1 à 1.32 eV. Nous pouvons observer clairement que le champ électrique est plus important lorsque la bande interdite du matériau BSF (SnS) est plus large ($E_g=1.32\text{eV}$).

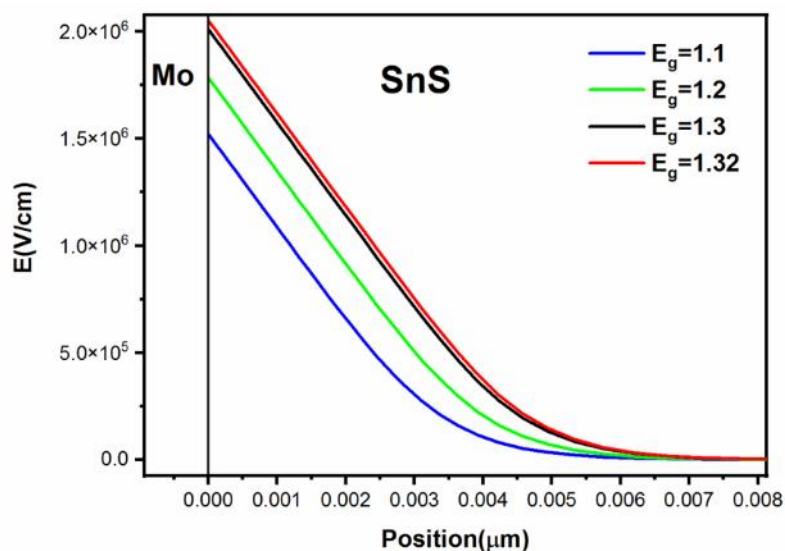


Figure III. 11 : Champ électrique pour une cellule solaire CIGS avec différentes énergies de gap de la couche BSF (SnS).

Cette augmentation du champ électrique contribue à accroître l'efficacité énergétique atteignant un PCE de 29.79%. Cependant, comme indiqué dans les références [6, 19], la diminution du facteur de forme au-delà de 1.3 eV est influencée

par la hauteur de la barrière formée pour les trous des porteurs de charge dans le diagramme de la bande de valence [6].

Selon l'équation I.14(chapitre I) [20], le facteur de forme est exprimé comme le rapport entre la puissance maximale $P_{max} = J_{max} \times V_{max}$ et la puissance théorique $P_{th} = J_{SC} \times V_{OC}$; lorsque FF diminue, V_{OC} et J_{SC} augmentent. Nous avons choisi 1.32 eV comme valeur optimale pour l'énergie de gap de la couche BSF.

III.4. Caractéristiques du dispositif solaire avec et sans BSF(SnS)

L'impact de l'incorporation de la couche SnS-P⁺ sur les caractéristiques courant-tension est illustré sur la figure III.12. L'introduction d'une couche SnS-P⁺ sur la face arrière de la cellule solaire Mo/SnS/CIGS/SnS₂/AZO permet d'améliorer considérablement les performances photovoltaïques de la cellule examinée. Avec l'ajout de la couche BSF (SnS), la tension de circuit ouvert est passée de 0.63V sans SnS-P⁺ à 0.87V avec SnS-P⁺. L'alignement correct de la bande BSF dans la structure proposée se traduira par un potentiel incorporé plus significatif en raison du décalage plus important de la bande, ce qui augmente la tension de circuit ouvert [21].

Dans la cellule solaire à dispositif CIGS, le facteur de forme est passé de 83.51% pour la cellule solaire sans SnS-P⁺ à 85.68% pour la cellule solaire avec couche SnS-P⁺. Cette augmentation d'environ 2.17 % peut s'expliquer par une augmentation de la puissance la plus importante P_m créée par la cellule PV à structure Mo/SnS/CIGS/SnS₂/AZO. Cette augmentation de la puissance externe maximale est le résultat du champ électrique créé sur la face arrière de la cellule, comme le montre la figure III.13, qui permet la réduction du taux de recombinaison près du contact arrière en molybdène, comme le montre la figure III.14. La présence d'un champ électrique près du contact ohmique à l'arrière permet aux porteurs de charges minoritaires d'être forcés vers la zone de déplétion pour une meilleure collecte [22], ce qui est évidemment confirmé par le diagramme QE comme on peut le voir sur la figure III.15. Ces modifications ont conduit à une forte augmentation du rendement de conversion de l'énergie solaire de la cellule CIGS en passant de 22.13% pour une cellule sans SnS-P⁺ à 29.79% pour la cellule avec la couche SnS-P⁺ insérée, étant donné la meilleure collecte des porteurs de charge et l'excellente stabilité grâce à l'existence de cette couche de surface arrière. De plus, nous avons résumé ces résultats dans le tableau III.2

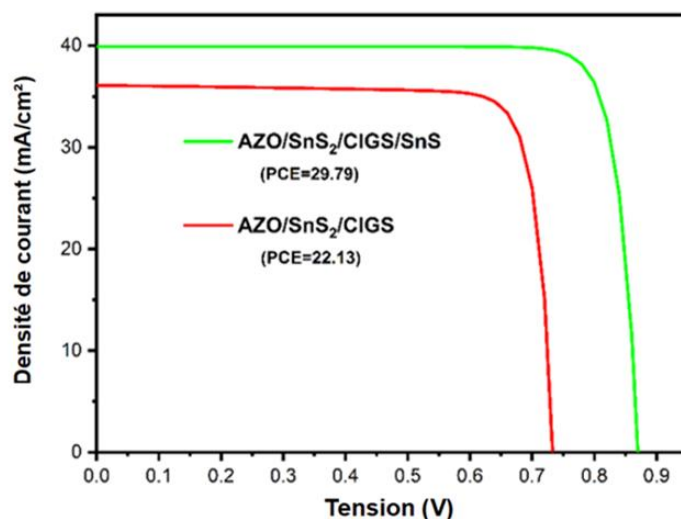


Figure III. 12 : Caractéristique J-V d'une cellule solaire CIGS avec et sans couche BSF (SnS)

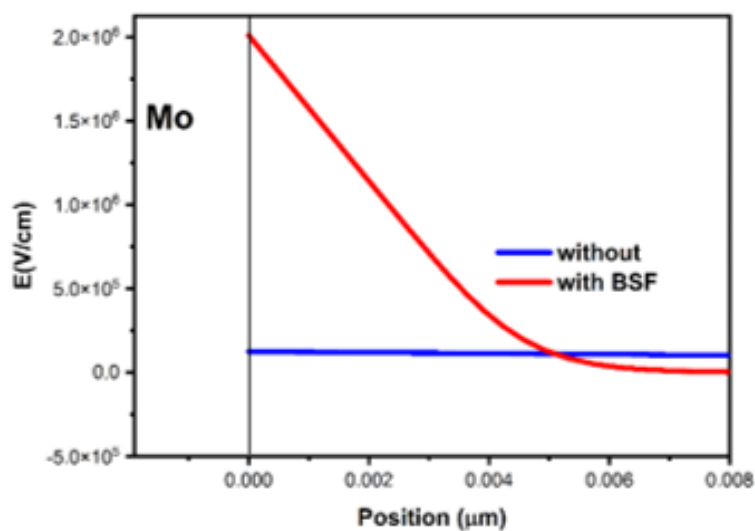


Figure III. 13 : Champ électrique pour une cellule solaire CIGS avec et sans couche BSF (SnS)

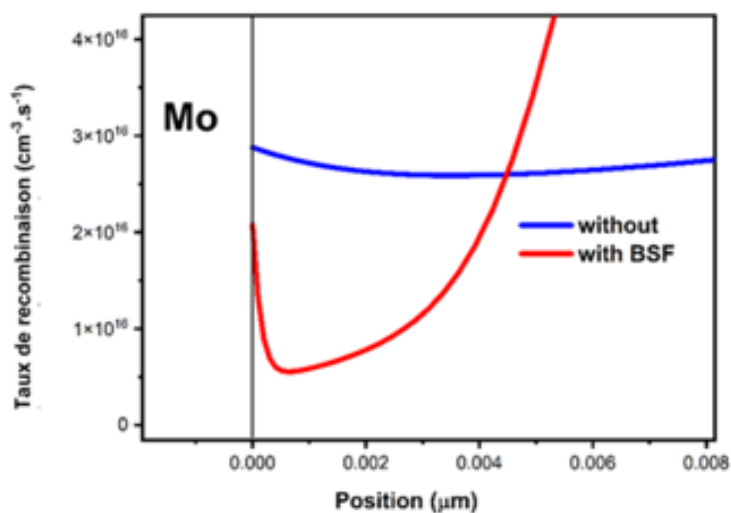


Figure III. 14 : Taux de recombinaison pour une cellule solaire CIGS avec et sans couche BSF (SnS)

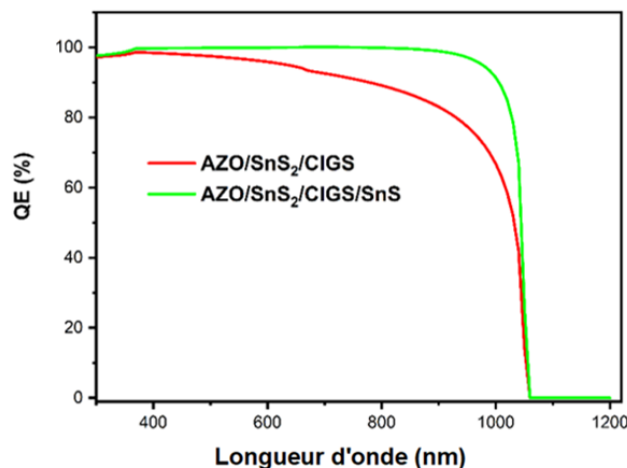


Figure III. 15 : Rendement quantique d'une cellule solaire CIGS avec et sans couche BSF (SnS)

Tableau III. 2 : Résultats de la simulation avec et sans couche SnS-P⁺.

Type de cellule CIGS	V _{OC} (V)	J _{SC} (mA/cm ²)	FF (%)	PCE (%)
Mo/CIGS/SnS ₂ /AZO	0.73	36.09	83.51	22.13
Mo/SnS/CIGS/SnS ₂ /AZO	0.87	39.92	85.68	29.79

Sur la figure III.15, la cellule solaire CIGS présente une absorption élevée qui permet d'atteindre un rendement quantique proche de 100 %, ce qui se traduit par une forte création de paires électron-trou avec peu de réflexion sur la surface avant. Pour les longueurs d'onde plus courtes que 400 nm, les pertes observées sont certainement dues à la réflexion sur la face avant. Pour les longueurs >1100 nm, une forte diminution de l'efficacité quantique est observée en raison de la transmission des photons de faible énergie qui ne peuvent pas être récoltés dans la cellule solaire. Généralement, les photons d'énergie moyenne sont capturés dans la zone de contact arrière, et les charges porteuses créées par ces photons augmentent légèrement le rendement énergétique du dispositif en raison de leur forte possibilité de recombinaison [10].

III.5. Optimisation de la couche absorbante.

Après avoir optimiser la couche BSF avec une épaisseur de 40 nm, une concentration de dopage de $3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ et une bande interdite de 1.32 eV (valeurs optimales), nous nous tournons vers l'optimisation de la couche CIGS. Étant donné que la couche absorbante constitue le composant principal pour l'absorption de la lumière solaire, notre focalisation se dirige vers l'amélioration de cette couche dans les configurations avec et sans couche de champ de surface arrière BSF(SnS). Cette partie

de simulation a été réalisée après la déposition d'une couche de CIGS d'une épaisseur de 1 μm . Dans les prochaines étapes de nos investigations, nous nous concentrerons sur l'étude des effets de N_A et de E_g de la couche active sur les paramètres de sortie de la cellule.

III.5.1. Optimisation de la concentration de dopage de la couche CIGS

Dans un premier temps, nous avons entrepris une étude approfondie visant à examiner l'effet de la densité de dopage N_A au sein de la couche active sur les performances de la cellule solaire CIGS. Cette étude a été réalisée en modifiant la densité de dopage N_A dans une plage allant de 5×10^{13} à $5 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$. Les résultats de ces simulations ont été enregistrés et sont présentés visuellement sur la figure III.16, mettant en évidence les variations des paramètres photovoltaïques en relation avec la densité de dopage.

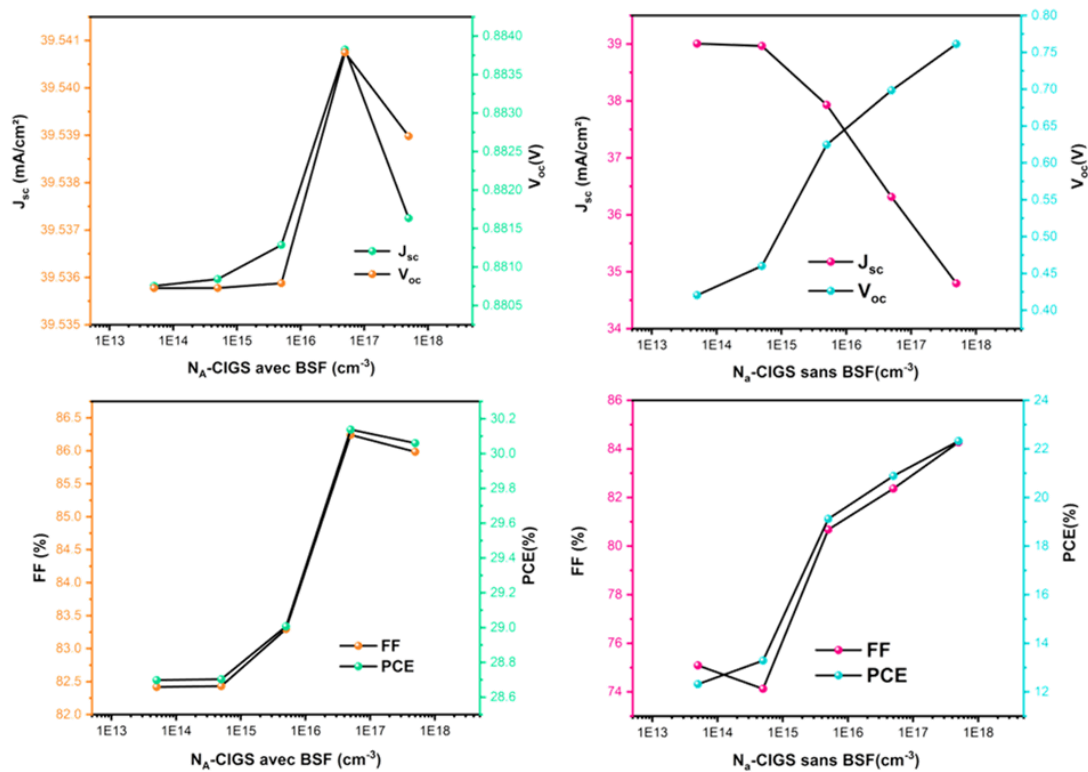


Figure III. 16 : Effet de la densité de l'accepteur CIGS avec et sans BSF sur la performance du dispositif solaire (V_{oc} , J_{sc} , FF , PCE).

À partir des graphes présentés avec couche BSF, nous avons observé que le comportement du courant de court-circuit et de la tension en circuit ouvert varie légèrement en fonction de la densité de dopage, atteignant leur valeur maximale

$J_{sc}=39.541\text{mA/cm}^2$ et $V_{oc}=0.88\text{ V}$ pour un dopage de $N_A=5 \times 10^{16}\text{ cm}^{-3}$. En ce qui concerne le facteur de forme et le rendement de conversion énergétique, nous avons constaté qu'ils augmentent lorsque le dopage passe de 5×10^{13} à $5 \times 10^{16}\text{ cm}^{-3}$, passant de 82.41% à 86.24% pour le FF et de 28.69% à 30.14% pour le PCE, puis diminuent légèrement pour un dopage de $5 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$. Alors que lorsqu'on supprime la couche BSF, les deux paramètres J_{sc} et V_{oc} sont nettement influencés. Le V_{oc} présente une augmentation, passant de 0.40 à 0.76 V, tandis que le J_{sc} subit une diminution de 39.00 à 34.79 mA/cm² lorsque le dopage varie de 5×10^{13} à $5 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$. Par ailleurs, le FF et le PCE affichent une croissance marquée, atteignant respectivement FF=84.27 % et PCE=22.32 % pour un dopage de $5 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$.

Après une analyse, nous avons observé que l'efficacité énergétique de la cellule dotée de BSF atteint son pic à $N_A=5 \times 10^{16}\text{ cm}^{-3}$, tandis que le rendement maximal de la cellule sans BSF est atteint à $N_A=5 \times 10^{17}\text{ cm}^{-3}$. Afin de parvenir à une interprétation éclairante, nous avons représenté graphiquement le champ électrique ainsi que le taux de recombinaison de la cellule solaire sur la figure III.17(a,b,c,d), en comparant les cas avec et sans BSF, pour ces deux valeurs distinctes des densités de dopage.

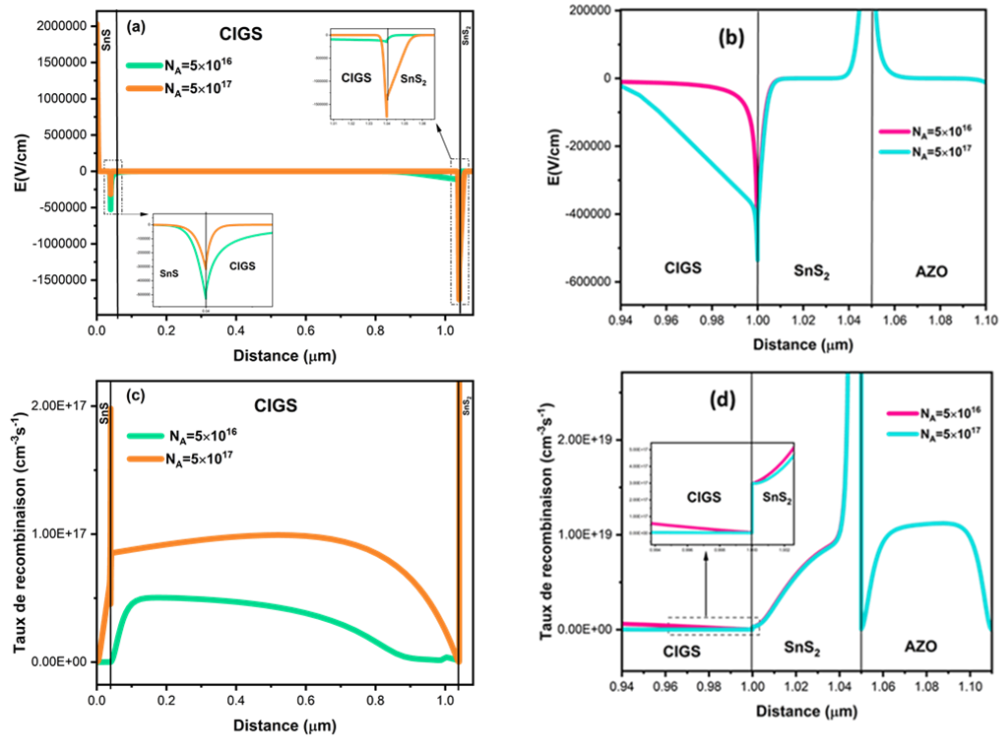


Figure III. 17 (a,b,c,d) :Champs électrique pour la cellule CIGS avec et sans BSF(a,b) et (c,d) taux de recombinaison avec et sans BSF pour deux valeurs du dopage N_A de la couche active

Pour les deux cas de la cellule solaire, nos observations ont révélé une corrélation entre l'augmentation de la densité de dopage et l'accroissement du champ électrique (Voir figure (III-17-(a,b)), conformément à l'équation suivante [23]:

$$E_p = \frac{-q N_A}{\epsilon_s} (x - X_p) \quad (\text{III.1})$$

L'intensité du champ électrique s'accroît de manière significative avec l'augmentation de la densité de dopage dans la région de la jonction PN (CIGS/SnS₂), qu'il s'agisse d'une cellule avec ou sans BSF(SnS). Toutefois, dans le cas de la cellule avec BSF, on observe une diminution du champ électrique au niveau de l'interface SnS/CIGS. Il est important de noter que l'augmentation de la densité de dopage entraîne également une augmentation notable des défauts présents dans la couche CIGS, ce qui favorise un taux de recombinaison élevé. Pour mieux appréhender ce phénomène, la figure III.17(c) illustre le taux de recombinaison de la cellule avec BSF. Nos observations indiquent que lorsqu'on atteint une densité de dopage de $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, le taux de recombinaison augmente significativement dans l'ensemble de la cellule solaire, entraînant une diminution de tous les paramètres photovoltaïques. C'est pourquoi une densité de dopage de $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ est considérée comme optimale avec un rendement de 30.14%.

Dans le cas de la cellule sans BSF, l'augmentation du champ, au niveau de l'interface CIGS/SnS₂, est suivie d'un faible taux de recombinaison en volume. Ce champ électrique intense est responsable de l'augmentation du courant de circuit ouvert améliorant ainsi le facteur de forme. Cette amélioration favorise une séparation plus efficace des charges photo-générées, ce qui conduit à une collecte plus efficace de ces charges, aboutissant à une efficacité énergétique de 22.32%. Toutefois le taux de recombinaison est important au niveau de l'interface CIGS/SnS₂ à cause des défauts causés par le dopage (Voir figure III. (d-17)) , ce qui diminue la densité de courant de court-circuit.

III.5.2. Optimisation de l'énergie de gap E_g de la couche CIGS

Dans la continuité de notre étude, nous nous sommes penchés sur l'impact de l'énergie de la bande interdite de la couche active CIGS, qui avait une épaisseur mince de 1 μm avec et sans BSF(SnS). Notre approche consistait à maintenir une densité de dopage constante pour la cellule avec BSF $N_A = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, tandis que pour la cellule

sans BSF $N_A = 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, des valeurs que nous avons identifiées comme optimales dans nos simulations. Nous avons modifié l'énergie de la bande interdite pour la cellule avec et sans BSF dans la plage de 1.1 à 1.4 eV. Par la suite, nous avons analysé les variations des paramètres photovoltaïques en fonction de l'énergie de la bande interdite, comme illustré sur la figure III.18.

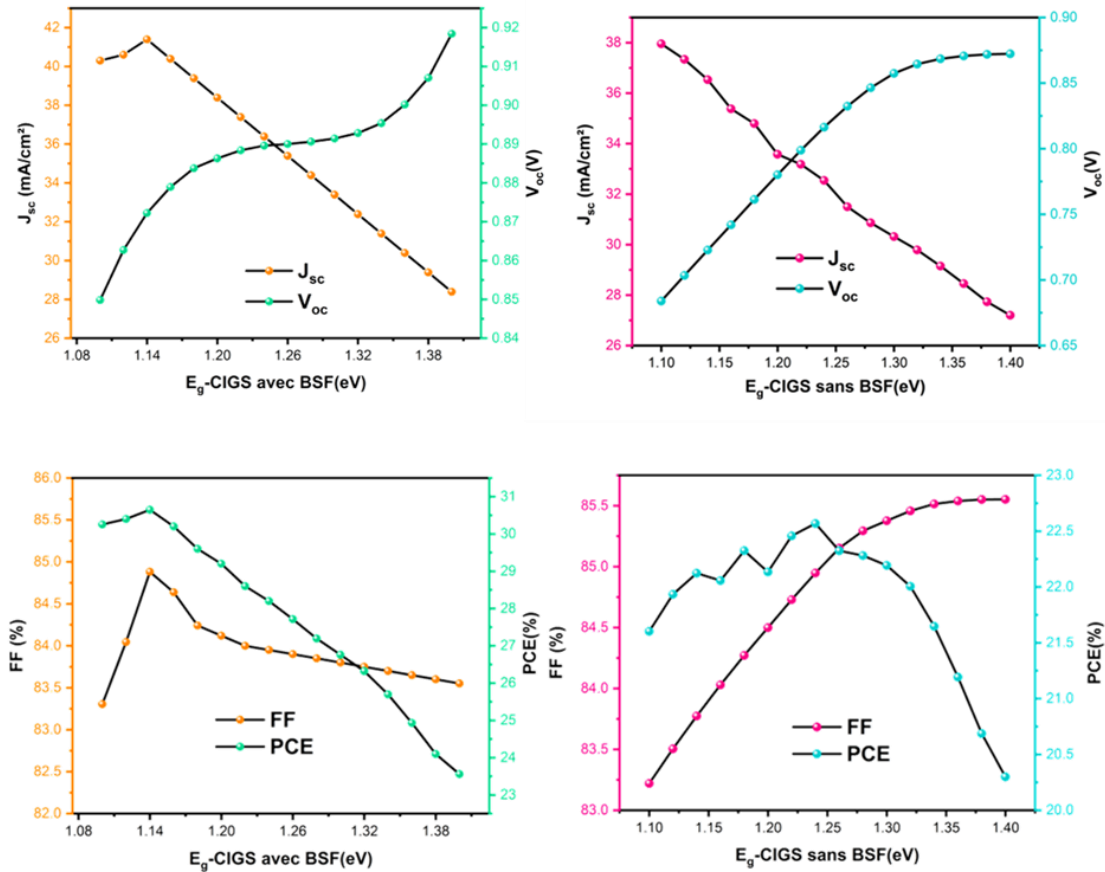


Figure III. 18 : Effet de l'énergie de gap CIGS avec et sans BSF sur la performance du dispositif solaire (V_{oc} , J_{sc} , FF, PCE).

Pour la cellule avec BSF, nous pouvons observer une augmentation significative de la tension à circuit ouvert V_{oc} qui croit de 0.85 à 0.92V à mesure que l'énergie de gap augmente. La densité de courant de court-circuit, le facteur de forme et l'efficacité énergétique présentent également une légère augmentation, dans l'intervalle de 1.1 à 1.14 eV, jusqu'à atteindre des valeurs maximales de $J_{sc} = 41.39 \text{ mA/cm}^2$, $FF = 84.88 \%$ et $PCE = 30.65 \%$. Ensuite, ces paramètres diminuent progressivement à $J_{sc} = 28.39 \text{ mA/cm}^2$, $FF = 83.55 \%$ et $PCE = 23.56 \%$ pour un gap de 1.4 eV. Alors que pour la cellule sans BSF, lorsque le gap varie de 1.1 à 1.4eV, nous constatons une augmentation du V_{oc} qui passe de 0.68 à 0.87 V, ainsi qu'une amélioration du FF, qui évolue de 83.22

à 85.55 %. En parallèle, le PCE présente une amélioration lorsque l'énergie de bande interdite est de 1.24 eV, atteignant une valeur autour de 22.57 %, il décroît ensuite de 20.30 % pour un gap de 1.4eV. En ce qui concerne le paramètre J_{sc} , nous observons une diminution progressive de 37.95 à 32.54mA/cm² lorsque l'énergie de gap augmente de 1.1 à 1.24 eV, suivie d'une forte réduction à 27.07mA/cm² pour un gap de 1.4 eV.

Nous avons remarqué que le rendement de conversion atteint son maximum pour la cellule sans BSF ($E_g=1.24\text{eV}$) et pour la cellule avec BSF ($E_g=1.14\text{eV}$). Après cela le rendement diminue pour les deux cas pour un gap de 1.4eV. Afin d'apporter une explication à cette observation, nous avons tracé sur la figure III.19(a,b,c,d) à la fois le champ électrique et le taux de recombinaison. De plus, la figure III.20(a,b) illustrent le diagramme de bande d'énergie de la cellule solaire, pour deux valeurs distincts en comparant les deux cas, pour la cellule sans BSF $E_g=1.24\text{eV}$ et $E_g=1.4\text{eV}$, tant dis que pour la cellule avec BSF $E_g=1.14\text{eV}$ et $E_g=1.4\text{eV}$

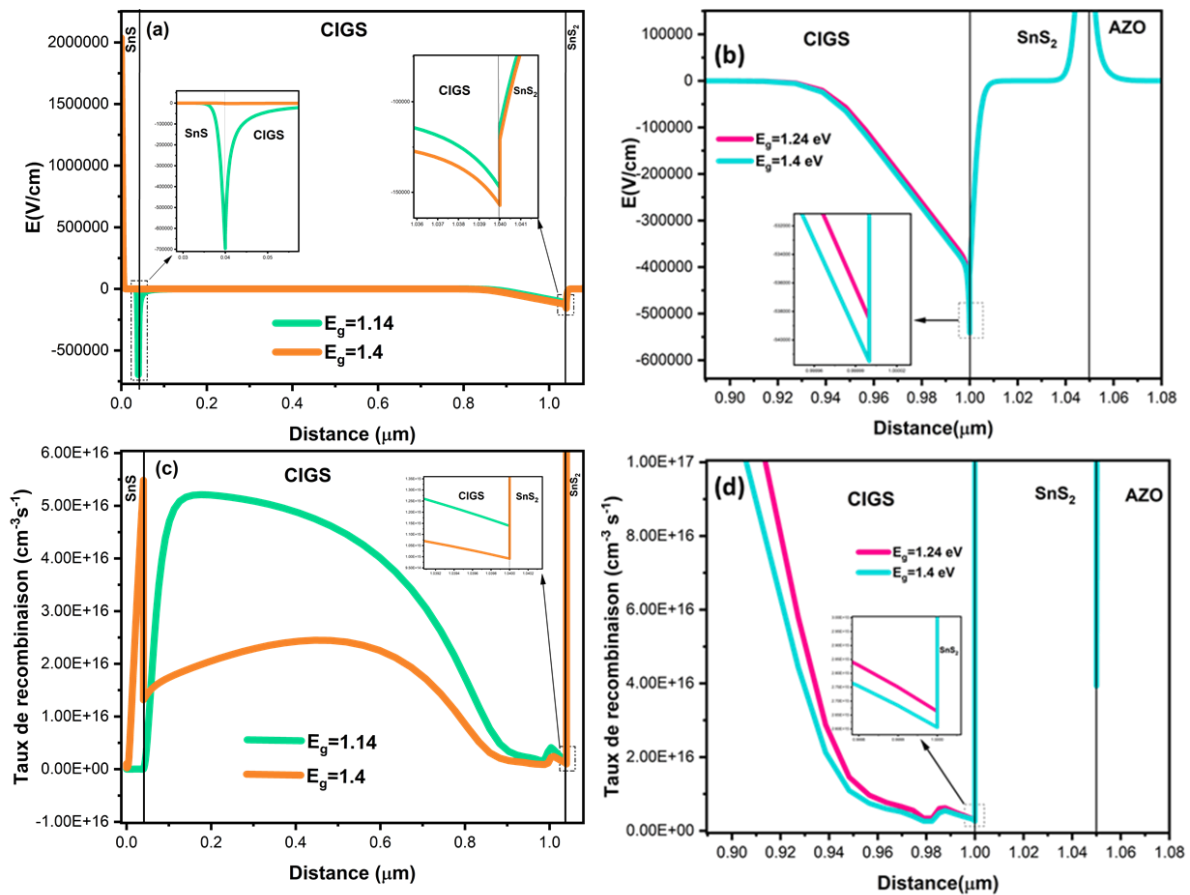


Figure III. 19 : Champs électrique pour la cellule CIGS avec et sans BSF(a,b) et (c,d) taux de recombinaison avec et sans BSF pour deux valeurs de l'énergie de gap de la couche active

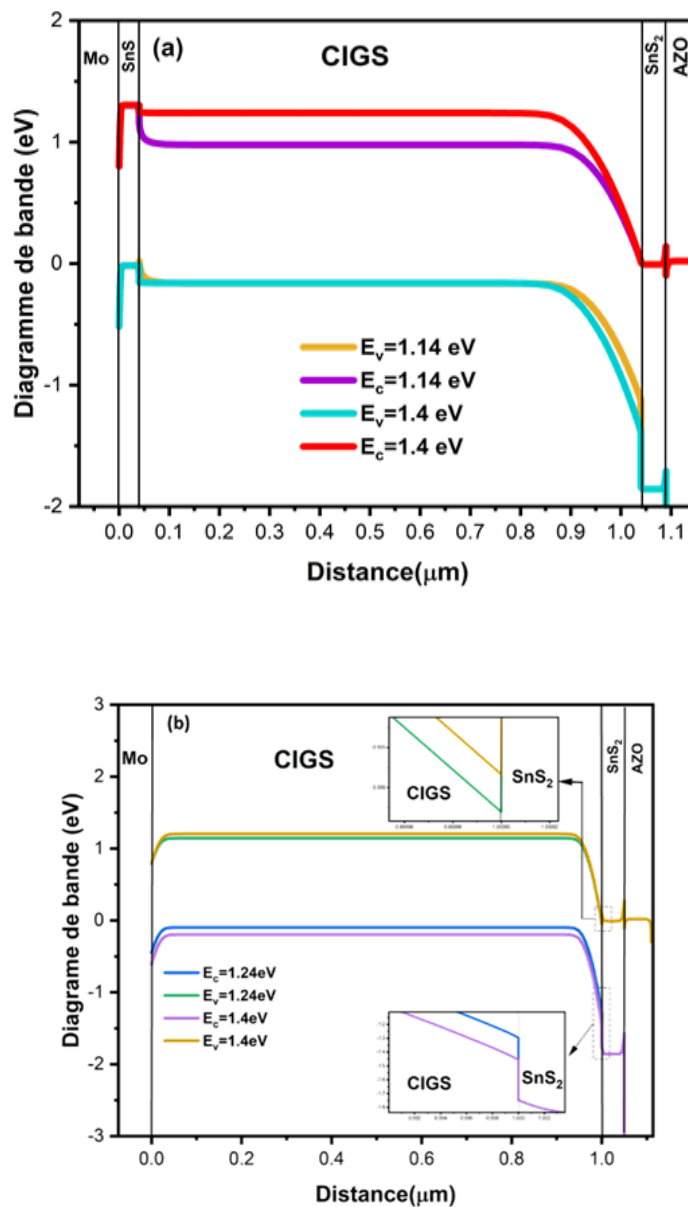


Figure III. 20 : Diagramme de bande pour une cellule solaire CIGS (a) avec BSF et (b) sans BSF pour deux valeurs différentes de l'énergie de gap de la couche active

Il est clairement observable que pour les deux cas de la cellule avec et sans BSF lorsque le gap augmente le champ électrique augmente au niveau de la jonction Absorbant/ETL, ce qui augmente le courant de circuit ouvert pour les deux cas, diminue ainsi la recombinaison à cette interface. La diminution du taux de recombinaison a pour conséquence une augmentation de la tension en circuit ouvert. [24,25].

Cependant, pour la cellule avec BSF le champ électrique devient faible au niveau de l'interface BSF/CIGS pour un large gap de 1.4eV, ce qui perturbe la collecte des trous par les contacts arrière de la cellule. La recombinaison devient élevée au niveau

de cette interface (Voir figure III. (19-c)). Le diagramme de bande pour la cellule avec BSF (Voir figure III. (20-a)) montre la formation d'une barrière de potentiel significative qui entrave le passage des porteurs de charge à l'interface SnS/CIGS lorsque le gap est de 1.4 eV. Cela peut causer la réduction de la densité de courant de court-circuit ainsi que le facteur de forme, entraînant une diminution de l'efficacité énergétique. Le rendement de conversion a atteint son maximum lorsque le gap est de 1.14eV caractérisé par une barrière de potentiel favorisant le mécanisme de génération de porteurs de charge, un champs électrique important au niveau des deux interfaces facilitant le transport de porteurs de charge et un faible taux de recombinaison ; cela conduit à l'amélioration de toutes les paramètres PV jusqu'au gap égale à 1.14eV (Voir figure III. (19-c)).

Toutefois, il est tout aussi intéressant de noter pour la cellule sans BSF que même au niveau précis de l'interface CIGS/SnS₂, où lorsque le gap augment le champ électrique induit est grand, le taux de recombinaison diminue à cette interface. Nous avons effectué un zoom de diagramme de bande sur la région Absorbant/ETL, mettant ainsi en évidence la diminution de la barrière de potentiel lorsque la largeur de la bande interdite (E_g) passe de 1.24 eV à 1.4 eV ce qui améliore le mécanisme de séparation de porteurs de charge au niveau de cette interface, augmente le courant de circuit ouvert et le facteur de forme .Cependant ce taux de recombinaison reste significativement élevé en volume de la couche absorbante lorsque le gap augmente. Cela peut être traduit par une réduction de la densité de courant de court-circuit, entraînant une élévation de l'efficacité énergétique jusqu'à un gap de 1.24eV puis diminution au-delà de cette valeur.

Afin de mieux comprendre les raisons pour lesquelles le rendement de conversion est plus élevé dans le cas de la cellule avec BSF pour un gap ($E_g= 1.14$ eV) et pour le cas de la cellule sans BSF pour un gap ($E_g= 1.24$ eV), nous avons présenté sur la figure III.21(a,b) le rendement quantique (QE) de la cellule photovoltaïque avec et sans BSF .

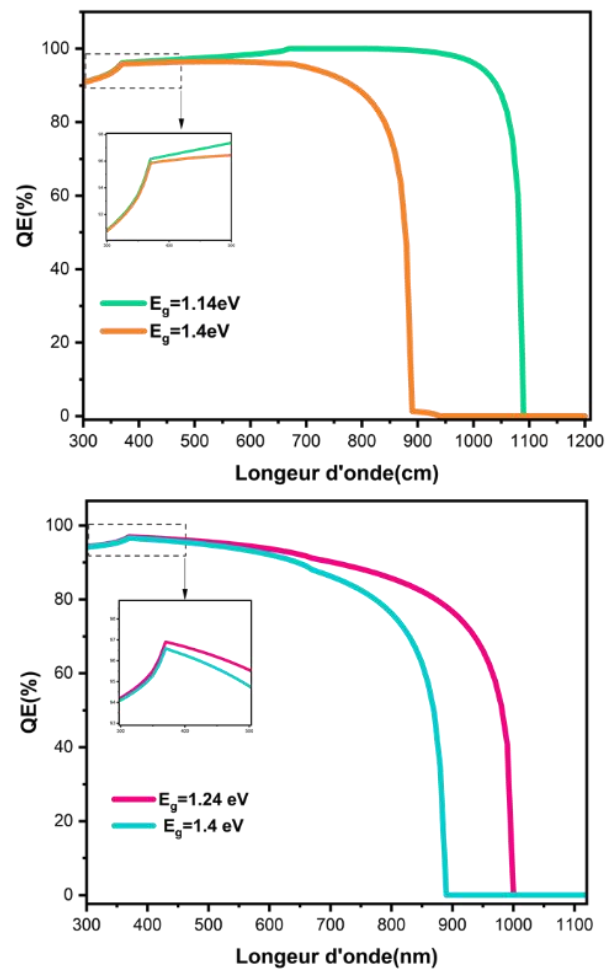


Figure III. 21 : Rendement quantique pour une cellule solaire CIGS (a) avec BSF et (b) sans BSF pour deux valeurs différentes de l'énergie de gap de la couche active

Nos observations indiquent que le QE est amélioré et atteint plus de 90% entre les longueurs d'onde 300nm et 600nm lorsque $E_g = 1.14$ eV pour la cellule avec BSF (Voir figure III.21-a) et $E_g = 1.24$ eV pour la cellule sans BSF (Voir figure III. (21-b)). Il est à noter que le rendement quantique se révèle être une caractéristique distinctive des cellules solaires à base de CIGS, affichant une valeur proche de 100 % dans la région du spectre visible [21]. C'est pourquoi, le rendement de conversion d'une cellule avec BSF a diminué au-delà de 1.14 eV, tandis que celui d'une cellule sans BSF a diminué au-delà de 1.24 eV. Cette baisse s'explique par le fait que les matériaux ayant une largeur de bande interdite élevée ne peuvent pas capturer l'intégralité des photons de longue longueur d'onde.[26]. En conséquence, la génération de paires électron-trou est limitée, ce qui conduit à une faible densité de porteurs libres et par conséquent, à une réduction des valeurs du courant de court-circuit.

III.6. Optimisation de la couche tampon SnS₂

Dans le cadre de notre travail visant à évaluer les performances de la cellule solaire avec BSF, nous nous pencherons sur l'amélioration de la couche tampon SnS₂. Pour ce faire, notre étude se concentrera sur l'optimisation de trois paramètres clés : l'épaisseur, la densité de dopage et l'énergie de gap. Nous analyserons ensuite l'impact de ces optimisations sur les paramètres de sortie de la cellule.

III.6.1. Optimisation de l'épaisseur de la couche SnS₂

Dans cette partie, nous avons systématiquement varié l'épaisseur de l'émetteur, dans une gamme s'étendant de 40 à 400 nm. Afin d'étudier l'impact de ces variations sur les paramètres photovoltaïques. Les résultats de cette analyse sont présentés sous forme de courbes sur la figure III.22.

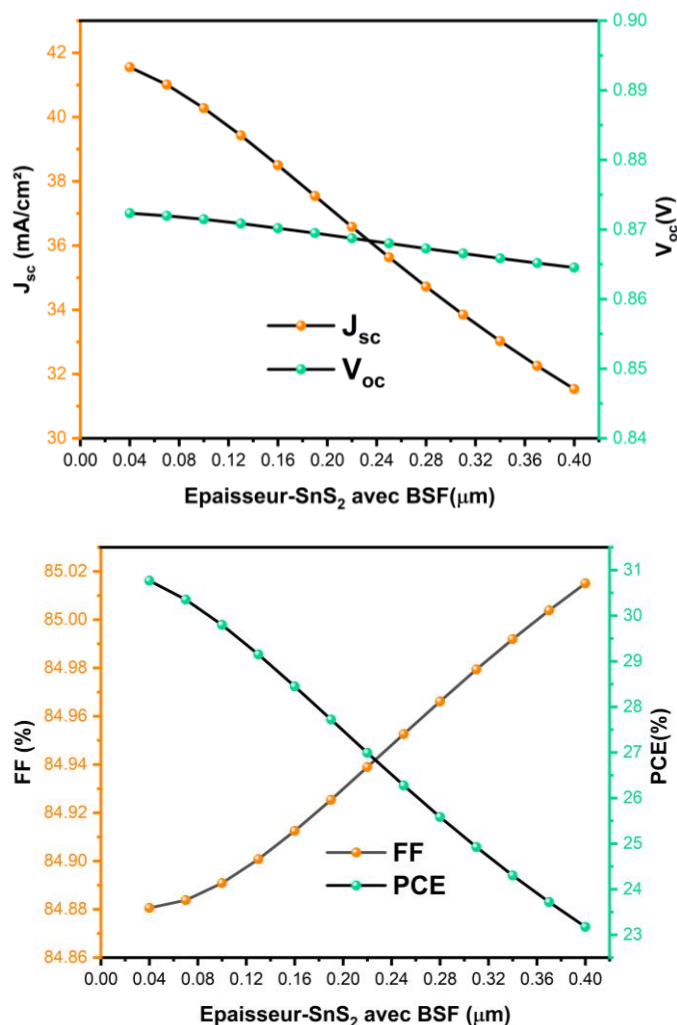


Figure III. 22 : Effet de l'épaisseur de la couche tampon avec BSF sur la performance du dispositif solaire. (a) Variation de Voc et Jsc. (b) Variation FF et PCE

À partir des données présentées sur les graphes de la figure III.22, une observation importante apparaît : l'augmentation de l'épaisseur de la couche SnS₂, de 40 à 400 nm, exerce une influence différente sur les propriétés des cellules solaires à base de CIGS. Plus précisément, la tension en circuit ouvert (V_{oc}) diminue légèrement de 0.872 à 0.865 V. Tandis que, le facteur de forme (FF) montre une légère amélioration de 84.88 à 85.02 %, en revanche son effet est plus importants sur la densité de courant de court-circuit (J_{sc}) qui diminue de 41.55 à 31.53 mA/cm², ce qui se traduit par une réduction notable du rendement global, chutant de 30.77 à 23.18 %. Cette diminution peut être attribuée à l'augmentation de l'épaisseur de la couche tampon, qui entraîne l'absorption d'un nombre accru de photons dans cette couche de type n, avant qu'ils n'atteignent la couche absorbante de type p. Les porteurs de charge photo-générés doivent ainsi parcourir des distances plus importantes que leurs longueurs de diffusion, ce qui accroît leur probabilité de recombinaison. Cette augmentation du taux de recombinaison est illustrée clairement sur la figure III.23

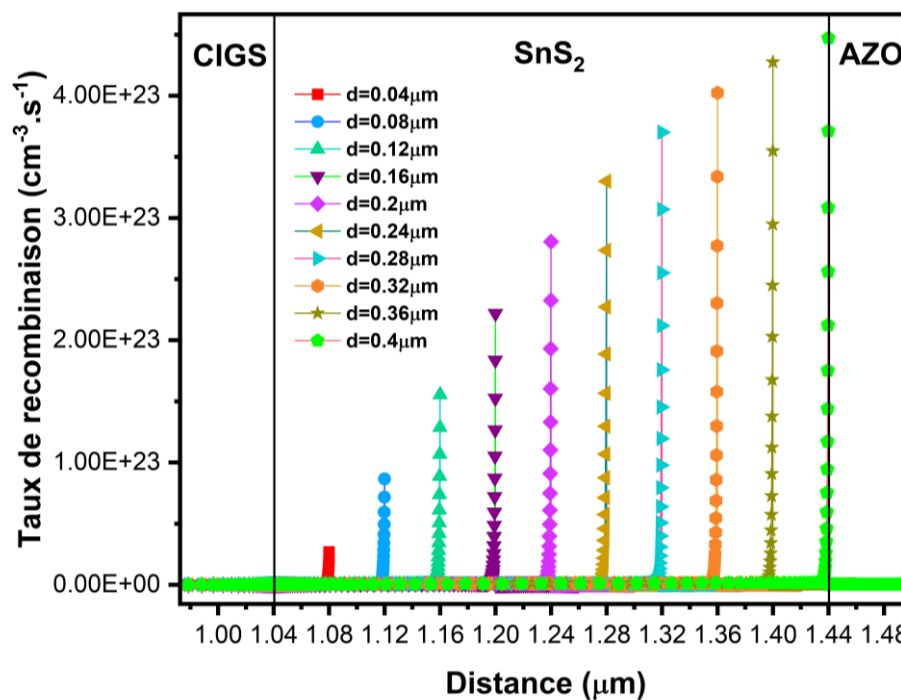


Figure III. 23 : Taux de recombinaison pour une cellule solaire CIGS avec BSF pour différentes valeurs de l'épaisseur de la couche tampon

La figure III.24 met en évidence la variation de l'efficacité quantique de la cellule en fonction de l'épaisseur de la couche tampon. Lorsque l'épaisseur de cette couche

augmente, une plus grande quantité de photons incidents est absorbée dans la couche tampon, réduisant ainsi le nombre de photons capturés dans la couche absorbante [27,28] Par conséquent, les photons absorbés dans la couche CIGS génèrent moins de paires électron-trou, ce qui entraîne une diminution du courant et de l'efficacité globale de la cellule [29].

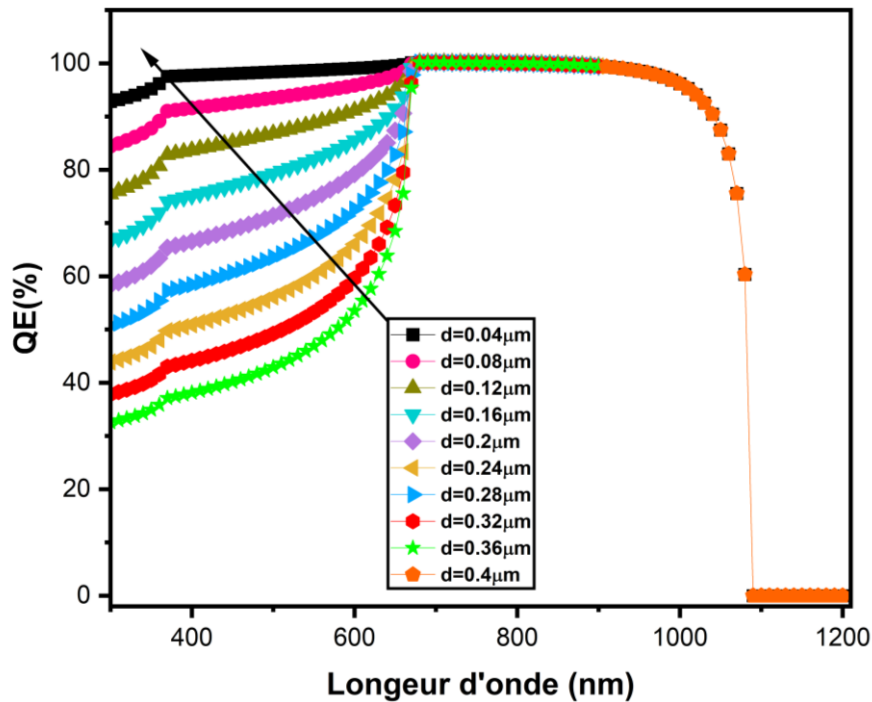


Figure III. 24 : Rendement quantique pour une cellule solaire CIGS avec BSF pour différentes valeurs de l'épaisseur de la couche tampon

Il est intéressant de noter que l'efficacité quantique est considérablement meilleure pour des épaisseurs faibles de SnS₂, principalement dans la plage de longueurs d'onde de 300 à 650 nm. Les photons de courte longueur d'onde génèrent des paires électron-trou, qui ont suffisamment de temps pour être collectées avant de subir une recombinaison, grâce à leurs longueurs de diffusion adéquates. Ainsi, l'épaisseur optimale de la couche tampon semble être de 40 nm.

III.6.2. Optimisation de la concentration de dopage de la couche SnS₂

Nous allons maintenant examiner l'effet du dopage N_D de la couche tampon sur une plage de concentrations allant de 1×10^{18} à $1 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, sur les paramètres de performance photovoltaïque de la cellule. Il est à noter que l'épaisseur de la couche

tampon a été maintenue constante à 40 nm et les courbes résultantes sont visibles sur la figure III.25.

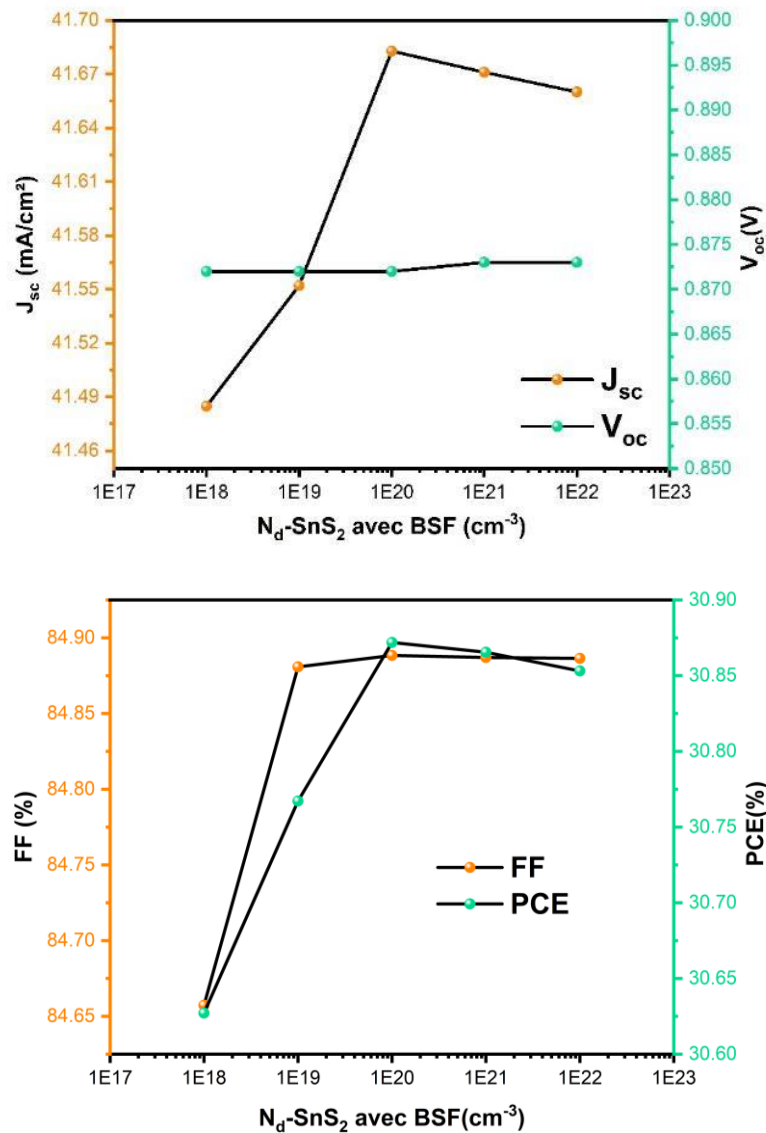


Figure III. 25 : Effet de la densité de dopage N_D de la couche tampon avec BSF(SnS) sur la performance du dispositif solaire. (a) Variation de V_{oc} et J_{sc} . (b) Variation FF et PCE

D'après les données présentées sur la figure III.25, il est possible d'observer un faible impact du dopage de la couche SnS₂. Lorsque nous augmentons le dopage de cette couche de 1×10^{18} à 1×10^{22} cm⁻³, la tension en circuit ouvert est quasi-constant. La densité de courant de court-circuit et le rendement suivent la même variation ; lorsque la densité de dopage passe de 1×10^{18} à 1×10^{20} cm⁻³, une augmentation de J_{sc} de 21 mA/cm² et de PCE de 25%. De manière similaire, le facteur de forme a montré

une légère augmentation, atteignant une valeur de 84.89% lorsque le dopage atteint $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Par la suite, le FF est resté pratiquement inchangé malgré l'augmentation ultérieure du dopage.

Lorsque le dopage passe de 1×10^{20} à $1 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$. Il est essentiel de noter que les performances de la cellule solaire ne présentent pas d'amélioration significative lorsque la concentration de dopage augmente [30]. Cette observation peut être expliquée par la réduction de la région de charge spatiale induite par une concentration de dopage plus élevée [31]. En conséquence, l'efficacité de collecte des porteurs de charge photoexcités diminue également. [32].

Pour améliorer notre compréhension, nous avons généré une représentation graphique du champ électrique au sein de notre structure CIGS/SnS₂/AZO, en considérant deux niveaux de dopage distincts ($N_D = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et $N_D = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$), comme illustré sur la figure III.26.

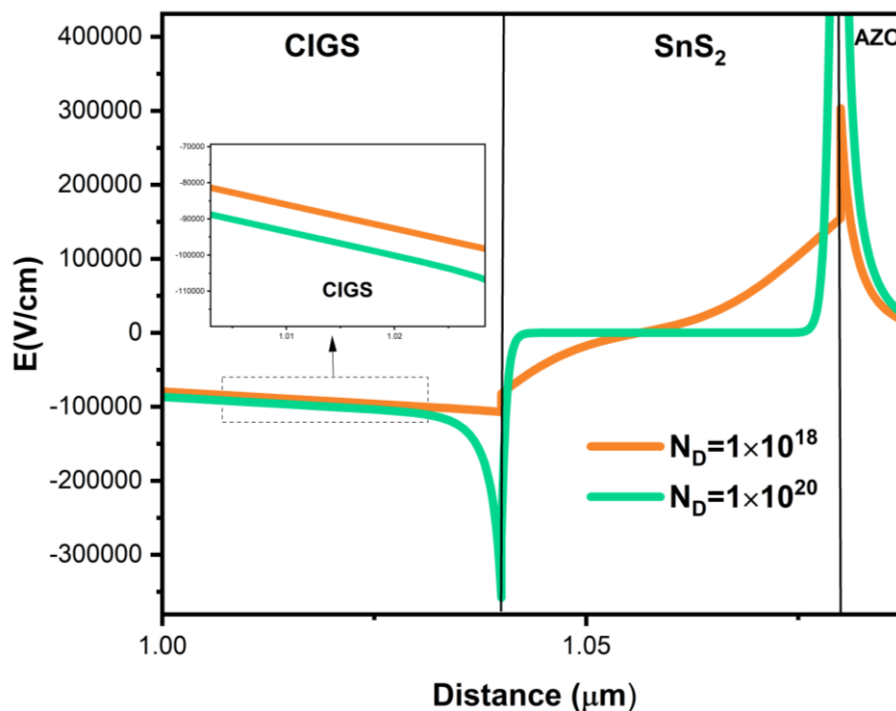


Figure III. 26 : Champs électrique pour une cellule solaire CIGS avec BSF pour deux valeurs de dopage N_D de la couche tampon

Nous constatons une corrélation notable entre l'augmentation de la densité de dopage et l'augmentation simultanée du champ électrique à travers l'ensemble du dispositif que nous avons étudié. Plus précisément, nous constatons que le champ électrique atteint des valeurs particulièrement élevées au niveau des deux interfaces

CIGS/SnS₂ et SnS₂/AZO lorsque la densité de dopage atteint 10²⁰ cm⁻³. Cette intensification du champ électrique favorise la séparation efficace des charges photogénérées. Cependant, une problématique émerge au sein de la couche tampon fortement dopée, où d'importants pièges pour les porteurs de charge se forment, ce qui réduit la probabilité de collecter les porteurs photogénérés et augmente la probabilité d'interaction. [33] Cette situation est étroitement liée à la relation inversement proportionnelle entre la durée de vie des porteurs de charge et la concentration des pièges. Par conséquent, le taux de recombinaison augmente [34,35]. Pour cela, nous avons représenté le taux de recombinaison pour des concentrations de 1 × 10¹⁸ cm⁻³ et 1 × 10²⁰ cm⁻³, comme indiqué sur la figure III.27.

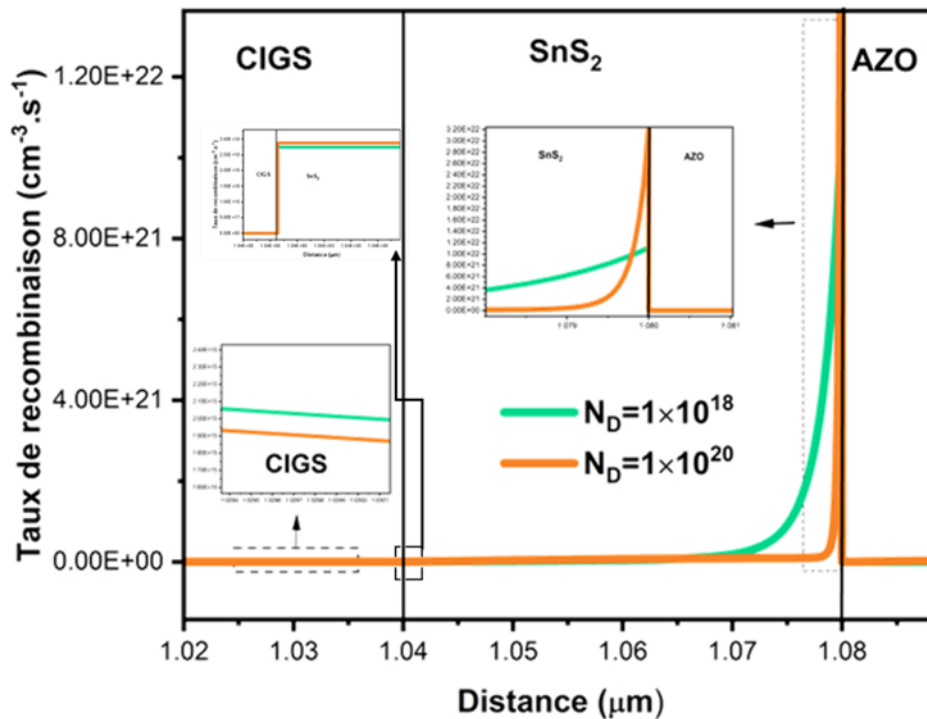


Figure III. 27 : Taux de recombinaison pour une cellule solaire CIGS avec BSF pour deux valeurs de dopage N_D de la couche tampon

Nous observons que pour les deux valeurs de la densité de dopage 1 × 10¹⁸ cm⁻³ et 1 × 10²⁰ cm⁻³, le taux de recombinaison est significativement élevé au niveau des deux jonctions, notamment à l'interface CIGS/SnS₂ et surtout à l'interface SnS₂/AZO, malgré la prédominance du champ électrique à ces emplacements. Cela explique pourquoi le rendement de conversion ne subit qu'une augmentation marginale de 0.25%, due à ce taux élevé de recombinaison.

En revanche, au sein de la couche active, nous remarquons une diminution du taux de recombinaison en volume (Voir figure III.27) pour une densité de dopage de 1

$\times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, accompagnée d'une augmentation du champ électrique (Voir figure III.26) favorisant ainsi une meilleure séparation des porteurs de charges photo-générés. En conséquence, une collecte plus efficace de ces porteurs conduit à un rendement de conversion maximal atteignant 30.87 %. Cette densité de dopage de $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ est considérée comme optimale pour la couche tampon SnS₂, confirmant ainsi la cohérence avec les résultats de la littérature [36]

III.6.3. Optimisation de l'énergie de gap de la couche SnS₂

Suite à notre étude, nous avons concentré notre attention sur l'optimisation de l'énergie de la bande interdite, située dans la plage de 1.8 à 2.9 eV, et son impact sur les paramètres de performance de la cellule photovoltaïque. À cette fin, nous avons maintenu une épaisseur constante de 40 nm et une densité de dopage de $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. Les résultats de nos simulations sont présentés de manière détaillée sur la figure III.28.

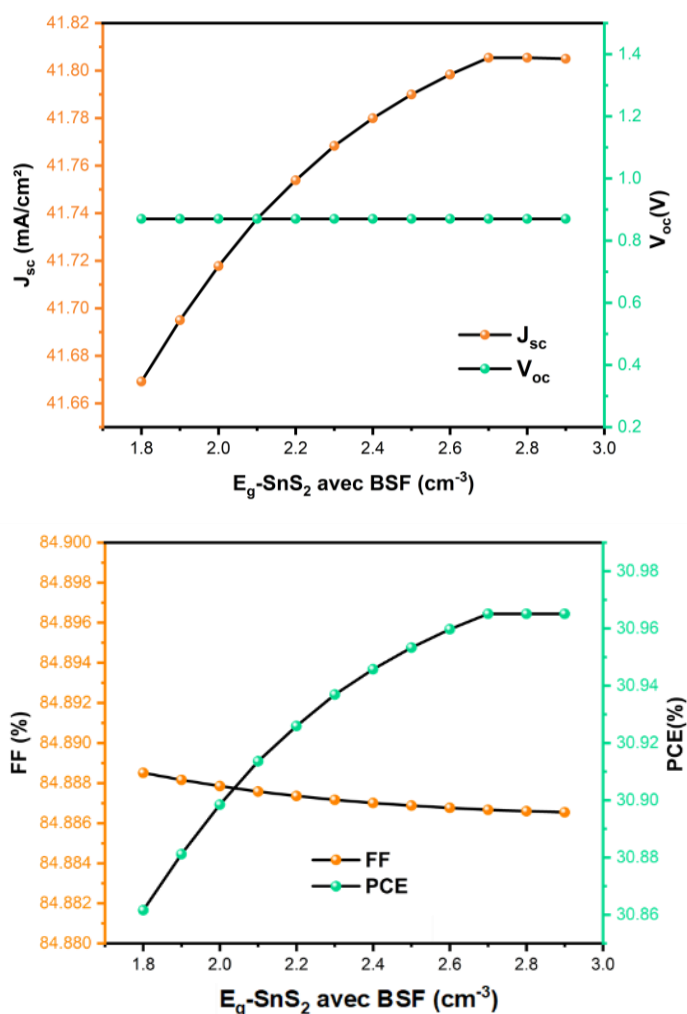


Figure III. 28 : Effet de l'énergie de gap de la couche tampon avec BSF(SnS) sur la performance du dispositif solaire. (a) Variation de V_{oc} et J_{sc} . (b) Variation FF et PCE

Selon les graphes présentés ci-dessus, nous pouvons constater que lorsque le gap du SnS₂ varie entre 1.8eV et 2.8eV, le courant de circuit ouvert reste inchangé, tout comme le facteur de forme, qui montre une très légère diminution mais reste essentiellement stable. En revanche la densité du courant en court-circuit et l'efficacité énergétique sont très peu affectés par l'augmentation de l'énergie de la bande interdite. Nous observons un faible changement de ces paramètres jusqu'à ce que nous atteignons des valeurs optimales de $J_{sc}=41.81$ et $PCE=30.97\%$ pour un gap correspondant à $E_g=2.7$ eV. Au-delà de ce seuil de gap énergétique, les performances en termes de J_{sc} et de PCE se stabilisent. Dans le but d'expliquer cela, nous avons tracé le graphe du champ électrique pour deux niveaux d'énergie distincts, à savoir 1.8 eV et 2.7 eV, comme illustré sur la figure III.29.

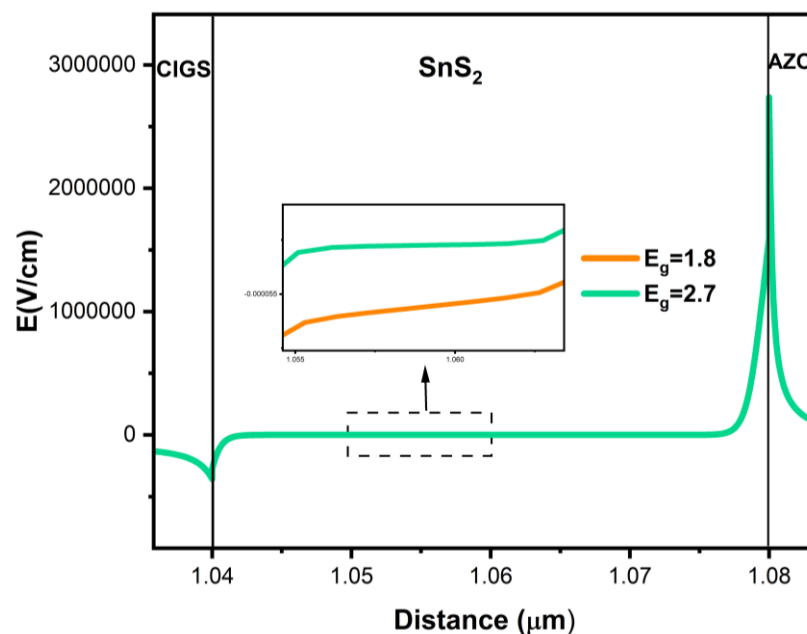


Figure III. 29 : Champs électrique pour une cellule solaire CIGS avec BSF pour deux valeurs de l'énergie de gap E_g de la couche tampon

Il est évident que le comportement du champ électrique est presque identique pour les deux valeurs de gap, couvrant pratiquement toutes les parties du dispositif étudié. L'influence de l'efficacité énergétique est très peu affectée lorsque le gap varie entre 1.8 et 2.7 eV. Afin d'observer précisément le comportement de ce champ, nous avons effectué un zoom au niveau de la couche tampon SnS₂ pour obtenir une visualisation plus précise des deux valeurs, à savoir 1.8 eV et 2.7 eV. Nous avons clairement remarqué qu'au niveau de la couche tampon, pour un gap de 2.7 eV, le champ est plus intense que pour un gap de 1.8 eV. Un faible taux de recombinaison est

remarqué pour un gap de 2.7 eV par rapport à un gap de 1.8 eV, comme le montre la figure III.30.

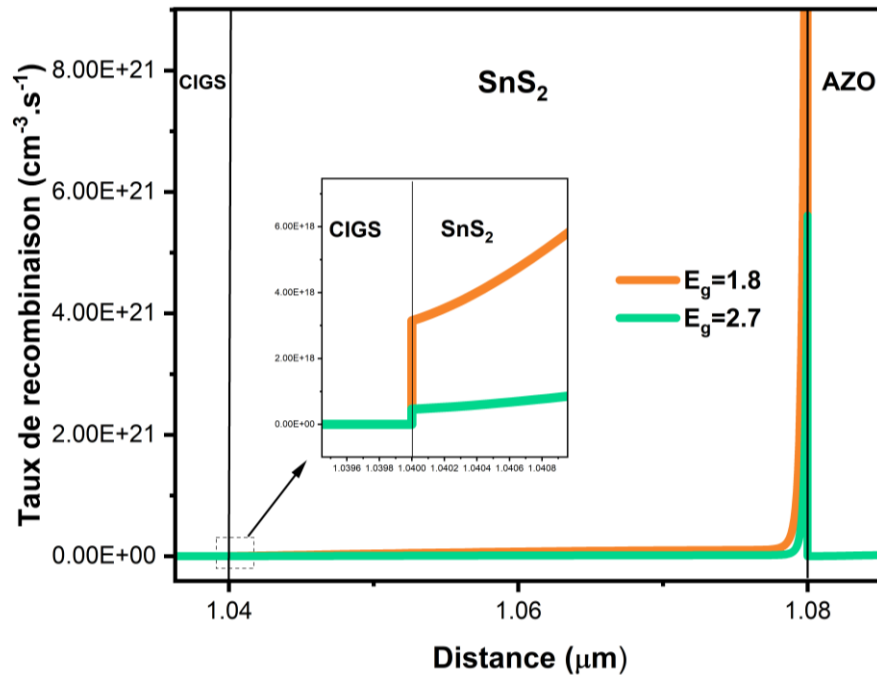


Figure III. 30 : Taux de recombinaison pour une cellule solaire CIGS avec BSF pour deux valeurs de l'énergie de gap E_g de la couche tampon

En effet, dans le contexte d'une cellule solaire CIGS, une couche tampon dotée d'une large bande interdite présente une caractéristique cruciale [37,38]. Cette particularité réside dans le fait que les photons de faible énergie ne sont pas capturés par la couche tampon, mais peuvent traverser celle-ci pour atteindre la couche active. Une fois dans la couche active, ces photons sont alors absorbés grâce à son faible gap énergétique [39], qui est de $E_{g_{CIGS}} = 1.14\text{eV}$ optimale dans notre cas. Cette absorption dans la couche active entraîne une augmentation significative du nombre de porteurs de charge photogénérés, ce qui, à son tour, génère un courant de court-circuit élevé, il est donc essentiel de sélectionner une couche tampon présentant une large bande interdite de 2.7eV afin d'obtenir un rendement de conversion environ 31%. Ce résultat est en agrément avec les résultats trouvés dans la littérature, où on peut trouver que la bande interdite pouvant atteindre jusqu'à 2.8 eV [40] et également 2.9eV [41]

III.7. Comparaison des caractéristiques de plusieurs travaux étudiés.

Les avantages de l'ajout d'une couche BSF (SnS) ultra-mince dans les TFSC à base de CIGS ont été étudiés dans cette recherche en utilisant SnS₂ comme couche tampon. Cette cellule est caractérisée par une efficacité de 22.57 % avec une couche

absorbante mince de 1 μm sans inclure la couche BSF. Cependant, l'introduction de la couche BSF améliore l'efficacité de manière significative. Un large éventail de matériaux, notamment Si, SiO₂, Al₂O₃, Cu₂O, CIS, MoSe₂, PbS, SnS...etc. ont été utilisés comme couche BSF par d'autres chercheurs, et leurs résultats sont présentés dans le tableau III.3 afin de comparer les valeurs d'efficacité énergétique avec le présent travail.

Tableau III. 3 : Analyse des caractéristiques de plusieurs travaux étudiés

Type de travail	Absorber layer	Buffer layer	BSF layer	PCE (%) with BSF	Ref
Experimental	CIGSe	CdS	MoS ₂	8.73	[42]
Experimental	CZT(S,Se)	CdS	MoS ₂	12.30	[4]
Experimental	CIGS	CdS	SiO ₂	15.6	[43]
Simulation	CZTS	AZTS	CZTS	5.05	[44]
Simulation	CZT(S,Se)	SnS ₂	MoS ₂	12.57	[4]
Simulation	CZTS	SnS ₂	MoS ₂	12.73	[45]
Simulation	CIGS	CdS	Al ₂ O ₃	13.08	[8]
Simulation	Sb ₂ Se ₃	Zn _{0.93} Mg _{0.07} O/ZnO _{0.4} S _{0.6}	MoSe ₂	15.46	[46]
Simulation	CdTe	CdS	MoO ₃	27.90	[47]
Simulation	CdTe	CdS	V ₂ O ₅	23.50	[48]
Simulation	CdTe	CdS	SnS	17.40	[22]
Simulation	CIGS	ZnMgO/ Zn(O,S)	CuS	17.67	[49]
Simulation	Sb ₂ Se ₃	CdS	SnS	17.75	[50]
Simulation	CZTS	SnS ₂	MoS ₂	18.94	[30]
Simulation	CZTS	In ₂ S ₃	MoS ₂	19.03	[30]
Simulation	CZTSSe	CdS	Zn ₃ P ₂	19.70	[51]
Simulation	CIGS	CdS	Si	21.3	[52]
Simulation	CZTS _{0.8} Se _{0.2}	CdS	a-Si:H	22.45	[53]
Simulation	SnSe	CdS	NiO	22.69	[54]
Simulation	CIGS	CdS	PbS	24.22	[15]
Simulation	CIGS	ZnMgO/ Zn(O,S)	CuSCN	24.4	[49]
Simulation	CIGS	CdS	CIS	25.05	[55]
Simulation	CIGS	CdS	Si	26	[56]
Simulation	CIGS	ZnS	MoSe ₂	26.30	[57]
Simulation	CIGS	ZnMgO/ Zn(O,S)	Cu ₂ O	27.3	[49]
Simulation	CIGS	SnS ₂	SnS	30.97	Nos resultants

Nous avons remarqué plusieurs recherches portant sur des structures solaires variées, utilisant une diversité de matériaux. Parmi ces matériaux, le SnS₂ et le SnS ont été étudiés en tant que couches BSF et tampons dans différentes études antérieures. Cependant, aucun de ces travaux n'a encore réussi à dépasser un rendement de 30.97%.

III.8. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons entrepris une simulation des caractéristiques PV d'une cellule solaire CIGS, dont la structure est : SLG/Mo/SnS/CIGS/SnS₂/AZO/Al. L'objectif de cette étude était de déterminer les paramètres optimaux pour maximiser les performances du dispositif déjà choisi dans le chapitre II. Nous avons analysé des éléments clés tels que la tension de circuit ouvert (Voc), la densité de courant de court-circuit (Jsc), le facteur de forme (FF) et le rendement de conversion d'énergie (PCE).

Notre étude s'est concentrée sur l'influence de trois couches différentes : la couche de champs de surface arrière BSF (SnS), la couche CIGS avec et sans la couche BSF(SnS), ainsi que la couche de transport d'électrons ETL(SnS₂). Nous avons effectué des optimisations sur des paramètres cruciaux tels que l'épaisseur, le dopage et l'énergie de bande interdite de chaque couche afin d'améliorer encore le PCE globale de la cellule solaire CIGS. Nous avons regardé la recombinaison, le champ électrique et le diagramme de bande d'énergie afin d'éclaircir nos observations.

Dans un premier temps, nous avons optimisé la couche BSF(SnS). Nos résultats montrent que l'ajustement de la couche BSF à une épaisseur de 40 nm, un dopage de $3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ et un gap de 1.32 eV offrent les performances les plus efficaces. L'ajout de la couche BSF engendre un champ électrique intense au niveau de la face arrière de la cellule, conduisant à un remarquable PCE de 29.79 %. Ceci s'accompagne d'un FF élevé de 85.68 %, d'une densité de courant de 39.92 mA/cm² et d'une tension de 0.87 V, le tout étant obtenu avec une épaisseur de couche active égale à 1 μm.

La comparaison des performances de la cellule en présence de la couche BSF et sans a montré la présence d'un champ électrique près du contact ohmique à l'arrière, qui se comporte comme une barrière de potentielle pour le transport des électrons vers la surface arrière, permettant une meilleure collecte. Ces modifications ont conduit à une forte augmentation de PCE de notre cellule en passant de 22.13% pour une cellule sans SnS-P⁺ à 29.79% pour la cellule avec la couche SnS-P⁺ insérée.

L'analyse du matériau CIGS a été essentielle pour optimiser la couche d'une épaisseur de 1 μm. L'augmentation du dopage N_A entraîne un taux de recombinaison élevé, provoquée par la présence d'une grande quantité de défauts dans la couche absorbante. Cependant, l'accroissement du champ électrique favorise le fonctionnement optimal de la cellule ; améliore le VOC et par conséquent le FF. Ainsi,

dans une cellule avec BSF, le PCE subit une diminution au-delà des valeurs considérées optimales. L'augmentation du gap induit un Voc plus important avec moins de recombinaison. Un absorbant ayant un gap élevé de 1.4eV ne peut pas capturer l'intégralité des photons de longue longueur d'onde, ce qui conduit à un faible Jsc. Pour le cas avec BSF un petit $E_{g(\text{avec BSF})}=1.14$ eV, l'alignement favorise le mécanisme de génération de porteurs de charge, un champs électrique assez important et un faible taux de recombinaison. Dans le cas sans BSF, malgré un large $E_{g(\text{sans BSF})}=1.4$ eV, un bon alignement de bande est observé. Cependant, la génération de paires électron-trou est entravée par un faible rendement quantique, la valeur de $E_{g(\text{sans BSF})}=1.24$ eV est choisie afin d'optimiser les paramètres de la cellule.

Il est important de noter qu'en l'absence de la couche BSF, la cellule nécessite un dopage très élevé de $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ainsi qu'une bande interdite importante de 1.24 eV pour atteindre une efficacité de seulement 22.57 %. En revanche, en présence de la couche BSF, nous avons observé une amélioration de tous les paramètres PV avec dopage inférieur à seulement $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et un gap de 1.14 eV ont suffi pour atteindre un rendement de 30.65%.

Dans la poursuite de notre étude, notre attention s'est portée sur l'optimisation de la couche ETL(SnS₂,) pour laquelle nous avons démontré que l'augmentation de son épaisseur a un impact négatif sur les performances de la cellule ; la longueur de diffusion des porteurs devient trop courte par rapport aux distances parcourues, ce qui entraîne une diminution de l'efficacité. Par conséquent, il est crucial de maintenir une épaisseur minimale d'ETL afin de favoriser la transmission maximale des porteurs au sein de la couche active. Nos résultats ont révélé qu'une épaisseur fine de 40 nm a permis d'obtenir les valeurs optimales des paramètres PV, avec un PCE =30.77 %. Nous avons optimisé également le dopage N_D de l'émetteur, où nous avons trouvé un PCE=30.87 % lorsque $N_D=1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. Au-delà de cette valeur, une légère diminution du rendement est observée en raison de l'augmentation du taux de recombinaison. La variation du gap indique qu'en raison de la grande largeur de gap, les photons de faible énergie ne sont pas absorbés dans la couche tampon. Au lieu de cela, ils peuvent traverser cette couche et atteindre la couche active, où ils sont absorbés en raison du faible gap énergétique du matériau CIGS (1.14 eV). Ce qui conduit à une augmentation du nombre de porteurs de charge photo-générés. En conséquence, cela se traduit par un

rendement optimal atteignant environ 31 % lorsque le matériau ETM présente une énergie de gap de 2.7 eV.

Malgré l'augmentation du rendement et la réduction de l'épaisseur de la couche absorbante, il est important de noter que le matériau CIGS reste toxique, ce qui peut présenter des risques environnementaux. C'est pourquoi nous avons opté pour le remplacement du matériau inorganique CIGS par un autre matériau organique à base de nanotubes de carbone (SWCNTs). Les résultats des simulations ainsi que leurs interprétations sont exposés de manière détaillée dans le chapitre suivant (chapitre IV).

Références:

- [1] A.K. Patel, P.K. Rao, R. Mishra, and S.K. Soni, "Numerical study of a high-performance thin film CIGS solar cell with a-Si and MoTe₂ hole transport layer." *Optik* 243, 167498 (2021).
- [2] W. Liu, H. Li, B. Qiao, S. Zhao, Z. Xu, and D. Song, "Highly efficient CIGS solar cells based on a new CIGS bandgap gradient design characterized by numerical simulation." *Solar Energy* 233, 337-344 (2022).
- [3] M.K. Sobayel, M.S. Chowdhury, T. Hossain, H.I. Alkhamash, S. Islam, M. Shahiduzzaman, Md Akhtaruzzaman, K. Techato, and M.J. Rashid, "Efficiency enhancement of CIGS solar cell by cubic silicon carbide as prospective buffer layer." *Solar Energy* 224, 271-278 (2021).
- [4] M. Haghghi, M. Minbashi, N. Taghavinia, D.-H. Kim, S.M. Mahdavi, and A.A. Kordbacheh, "A modeling study on utilizing SnS₂ as the buffer layer of CZT(S,Se) solar cells." *Solar Energy* 167, 165-171 (2018).
- [5] T. Pansuriya, R. Malani, and V. Kheraj, "Investigations on the effect of buffer layer on CMTS based thin film solar cell using SCAPS 1-D." *Opt. Mater.* 126, 112150 (2022).
- [6] H. Aissani, A. Helmaoui, and H. Moughli, "Numerical modeling of graded band-gap cigs solar cell for high efficiency." *Int. J. Appl. Eng. Res.* 12, 227-232 (2017).
- [7] K.R. Ngoy, A.K. Singh, T.-C. Jen, and A.M. Ali, "Numerical analysis of thin film Cu₂InGaSe₄ solar cells design." *Solar Energy* 225, 53-59 (2021).
- [8] N.E.I. Boukourt, S. Patanè, M. Adouane, and R. AlHammadi, "Numerical optimization of ultrathin CIGS solar cells with rear surface passivation." *Solar Energy* 220, 590-597 (2021).
- [9] T. AlZoubi, A. Moghrabi, M. Moustafa, and S. Yasin, Efficiency boost of CZTS solar cells based on double-absorber architecture: Device modeling and analysis. *Solar Energy* 225, 44-52 (2021).
- [10] V.C. Karade, J.S. Jang, D. Kumbhar, M. Rao, P.S. Pawar, S. Kim, K.S. Gour, et al., Combating open circuit voltage loss in Sb₂Se₃ solar cell with an application of SnS as a back surface field layer. *Solar Energy* 233, 435-445 (2022).
- [11] Omrani, M. K., Minbashi, M., Memarian, N., & Kim, D. H. Improve the performance of CZTSSe solar cells by applying a SnS BSF layer. *Solid-State Electronics*, 141, 50-57(2018).
- [12] B.C. Mohanty, Improving performance of Cu₂ZnSnS₄ solar cell via back contact interface engineering. *Solar Energy* 230, 986-995 (2021).
- [13] E. Oublal, M. Sahal, and A.A. Abdelkadir, New theoretical analysis of a novel hetero-junction SnS/CdS solar cell with homo-junction P-P+ in the rear face-numerical approach. *Curr. Appl. Phys.* 39, 230-238 (2022).
- [14] M.S. Rana, M.M. Islam, and M. Julkarnain, Enhancement in efficiency of CZTS solar cell by using CZTSe BSF layer. *Sol. Energy* 226, 272 (2021).
- [15] Barman, B., & Kalita, P. K. Influence of back surface field layer on enhancing the efficiency of CIGS solar cell. *Solar Energy*, 216, 329-337. (2021).
- [16] H. Aissani, A. Helmaoui, and H. Moughli, Numerical modeling of graded band-gap cigs solar cell for high efficiency. *Int. J. Appl. Eng. Res.* 12, 227 (2017)
- [17] K. Ali, and Z. Ali, Analytical study of electrical performance of SiGe-based n+p-p+ solar cells with BaSi₂ BSF structure. *Sol. Energy* 225, 91 (2021)
- [18] Li, J., Liu, X., Liu, W., Wu, L., Ge, B., Lin, S., ... & Zhang, Y. Restraining the Band Fluctuation of CBD-Zn (O, S) Layer : Modifying the Hetero-Junction Interface for High Performance Cu₂ZnSnSe₄ Solar Cells with Cd-Free Buffer Layer. *Solar Rrl*, 1(10), 1700075(2017).
- [19] A. Lafuente-Sampietro, K. Yoshida, S. Wang, S. Ishizuka, H. Shibata, N. Sano, K. Akimoto, and T. Sakurai, Effect of the double grading on the internal electric field and on the carrier collection in CIGS solar cells. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 223, 110948 (2021).
- [20] Guesmi, O., Arbia, M. B., Saidi, F., Rabeh, M. B., & Maaref, H. Experimental and computational studies of CCTS material: Novel design of solar cell for high efficiency. *Solar Energy*, 262, 111806. (2023).

- [21] M. Al-Hattab, M. Khenfouch, O. Bajjou, Y. Chrafh, and K. Rahmani, Numerical simulation of a new heterostructure CIGS/ GaSe solar cell system using SCAPS-1D software. *Sol. Energy* 227, 13 (2021).
- [22] S. Benabbas, Z. Rouabah, N. Bouarissa, and N. Chelali, The role of back surface feldSnS layer in improvement of efficiency of CdTe thin film solar cells. *Optik* 127(15), 6210 (2016).
- [23] Fatiha, A. Z. Z. E. M. O. U. En vue de l'obtention du Diplôme de Doctorat en Sciences (Doctoral dissertation, Université de Mostaganem) (2022).
- [24] Hamri, Y. Z., Bourezig, Y., Medles, M., Ameri, M., Toumi, K., Ameri, I., ... & Voon, C. H. Improved efficiency of Cu (In, Ga) Se₂ thinfilm solar cells using a buffer layer alternative to CdS. *Solar Energy*, 178, 150-156. (2019).
- [25] Saadat, M., Amiri, O., & Rahdar, A. Optimization of (Zn, Sn) O buffer layer in Cu (In, Ga) Se₂ based solar cells. *Solar Energy*, 189, 464-470(2019).
- [26] Zhou, B., Yin, X., Zhang, J., Zeng, G., Li, B., Zhang, J., & Feng, L. Numerical simulation of an innovative high efficiency solar cell with CdTe/Si composite absorption layer. *Optical Materials*, 110, 110505. (2020).
- [27] Rahman, M. F., Mahmud, N., Alam, I., Ali, M. H., Moon, M. M. A., Kuddus, A., ... & Hossain, M. K. Design and numerical analysis of CIGS-based solar cell with V₂O₅ as the BSF layer to enhance photovoltaic performance. *AIP Advances*, 13(4) (2023).
- [28] Hossain, M. K., Samajdar, D. P., Das, R. C., Arnab, A. A., Rahman, M. F., Rubel, M. H. K., ... & Mohammed, M. K. Design and simulation of Cs₂BiAgI₆ double perovskite solar cells with different electron transport layers for efficiency enhancement. *Energy & Fuels*, 37(5), 3957-3979. (2023).
- [29] Mabvuer, F. T., Nya, F. T., Dzifack Kenfack, G. M., & Laref, A. Lowering Cost Approach for CIGS-Based Solar Cell Through Optimizing Band Gap Profile and Doping of Stacked Active Layers— SCAPS Modeling. *ACS omega*, 8(4), 3917-3928 (2023).
- [30] Tripathi, S., Kumar, B., & Dwivedi, D. K. Numerical simulation of non-toxic In₂S₃/SnS₂ buffer layer to enhance CZTS solar cells efficiency by optimizing device parameters. *Optik*, 227, 166087(2021).
- [31] Crovetto, A., Huss-Hansen, M. K., & Hansen, O. How the relative permittivity of solar cell materials influences solar cell performance. *Solar Energy*, 149, 145-150] (2017).
- [32] Lin, P., Lin, L., Yu, J., Cheng, S., Lu, P., & Zheng, Q. Numerical simulation of Cu₂ZnSnS₄ based solar cells with In₂S₃ buffer layers by SCAPS-1D. *Journal of Applied Science and Engineering*, 17(4), 383-390. (2014).
- [33] Abd El Halim, B., Mahfoud, A., & Elamine, D. M. Numerical analysis of potential buffer layer for Cu₂ZnSnS₄ (CZTS) solar cells. *Optik*, 204, 164155. (2020).
- [34] Gray, J. L. The physics of the solar cell. *Handbook of photovoltaic science and engineering*, 2, 82-128 (2011).
- [35] Tripathi, S., Lohia, P., & Dwivedi, D. K. Contribution to sustainable and environmental friendly non-toxic CZTS solar cell with an innovative hybrid buffer layer. *Solar Energy*, 204, 748-760(2020).
- [36] Melliti, A. Numerical prediction and optimization of the performance of CCTS-based thin film solar cell. *Optik*, 281, 170837(2023).
- [37] Maoucha, A., Ferhati, H., Djeflal, F., & AbdelMalek, F. Highly efficient Cd-Free ZnMgO/CIGS solar cells via effective band-gap tuning strategy. *Journal of Computational Electronics*, 22(3), 887-896 (2023).
- [38] Kacha, K., Djeflal, F., Ferhati, H., Foughali, L., Bendjerad, A., Benhaya, A., & Saidi, A. Efficiency improvement of CIGS solar cells using RF sputtered TCO/Ag/TCO thin-film as prospective buffer layer. *Ceramics international*, 48(14), 20194-20200. (2022).
- [39] Yousuf, M. H., Saeed, F., & Tauqeer, H. A. Numerical Investigation of Cu₂O as Hole transport layer for High-Efficiency CIGS solar cell(2022).
- [40] Gedi, S., Alhammadi, S., Noh, J., Minnam Reddy, V. R., Park, H., Rabie, A. M., ... & Kim, W. K. SnS₂ nanoparticles and thin film for application as an adsorbent and photovoltaic buffer. *Nanomaterials*, 12(2), 282(2022).

- [41] Tsukigase, H., Suzuki, Y., Berger, M. H., Sagawa, T., & Yoshikawa, S. Wet chemical synthesis and self-assembly of SnS₂ nanoparticles on TiO₂ for quantum dot-sensitized solar cells. *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, 11(4), 3215-3221. (2011).
- [42] S.-T. Kim, V. Bhatt, Y.-C. Kim, H.-J. Jeong, J.-H. Yun, and J.-H. Jang, "Formation of MoSe₂ layer and Ga grading in flexible Cu (In, Ga) Se₂ solar cell via Na diffusion." *J. Alloy. Compd.* 899, 163301 (2022).
- [43] F. Ghamsari-Yazdel and A. Fattah, "Performance enhancement of CIGS solar cells using ITO as buffer layer." *Micro Nanostruct.* 168, 207289 (2022).
- [44] M. Jamil, M. Amami, A. Ali, K. Mahmood, and N. Amin, Numerical modeling of AZTS as buffer layer in CZTS solar cells with back surface field for the improvement of cell performance. *Sol. Energy* 231, 41-46 (2022).
- [45] F. Belarbi, W. Rahal, D. Rached, and M. Adnane, A comparative study of different buffer layers for CZTS solar cell using Scaps-1D simulation program. *Optik* 216, 164743 (2020).
- [46] I. Gharibshahian, A. A. Orouji, and S. Sharbati, "Towards high efficiency Cd-Free Sb₂Se₃ solar cells by the band alignment optimization." *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 212, 110581 (2020).
- [47] Ç. Çetinkaya, "Efficient and high-bifacial CdTe-based solar cell enabled by functional designed dielectric/metal/dielectric transparent top contact via light management engineering." *Opt. Mater.* 133, 113003 (2022).
- [48] A. Kuddus, M. F. Rahman, S. Ahmmed, J. Hossain, and A. B. M. Ismail, "Role of facile synthesized V₂O₅ as hole transport layer for CdS/CdTe heterojunction solar cell: validation of simulation using experimental data." *Superlattices Microstruct.* 132, 106168 (2019).
- [49] Gharibshahian, I., Orouji, A. A., & Sharbati, S. Effectiveness of band discontinuities between CIGS absorber and copper-based hole transport layer in limiting recombination at the back contact. *Materials Today Communications*, 33, 104220. (2022).
- [50] Karade, V. C., Jang, J. S., Kumbhar, D., Rao, M., Pawar, P. S., Kim, S., ... & Kim, J. H. Combating open circuit voltage loss in Sb₂Se₃ solar cell with an application of SnS as a back surface field layer. *Solar Energy*, 233, 435-445. (2022)
- [51] P. S. Babu, P. K. Singh, A. K. Thakur, and D. K. Dwivedi, "Optimization of photovoltaic solar cell performance via the earth abundant Zn₃P₂ back surface field." *Optik* 229, 166235 (2021).
- [52] H. Heriche, Z. Rouabah, and N. Bouarissa, "New ultra-thin CIGS structure solar cells using SCAPS simulation program." *Int. J. Hydrogen Energy* 42, 9524 (2017).
- [53] N. Kumari and S. Ingole, "Enhancement of CZTS photovoltaic device performance with silicon at back-contact: A study using SCAPS-1D." *Sol. Energy* 236, 301 (2022).
- [55] R.K. Yadav, P.S. Pawar, R. Nandi, K.E. Neerugatti, Y.T. Kim, J.Y. Cho, and J. Heo, A qualitative study of SnSe thin film solar cells using SCAPS 1D and comparison with experimental results: a pathway towards 22.69% efficiency. *Solar Energy Mater. Solar Cells* 244, 111835 (2022).
- [56] Boukourt, N. E. I., Patanè, S., & Abdulraheem, Y. M. Numerical investigation of CIGS thin-film solar cells. *Solar Energy*, 204, 440-447(2020).
- [57] R.N. Mohottige, and S.P.K. Vithanage, Numerical simulation of a new device architecture for CIGS-based thin-film solar cells using 1D-SCAPS simulator. *J. Photochem. Photobiol. A: Chem.* 407, 113079 (2021).
- [58] T.N. Fridolin, D.K.G. Maurel, G.W. Ejuh, T.T. Benedicte, and J.M. Ndjaka. Highlighting some layers properties in performances optimization of CIGSe based solar cells: case of Cu (In, Ga) Se–ZnS. *J. King Saud Univ.-Sci.* 31(4), 1404-1413 (2019)

IV. Chapitre IV

Étude de performance : Remplacement de la couche absorbante
CIGS par une couche organique SWCNTs

IV.1. Introduction :

Ce chapitre se concentre sur l'élimination complète du matériau inorganique CIGS, nocif pour l'environnement. Nous le remplaçons par un nouveau matériau organique, les nanotubes de carbone monoparois ou bien à parois simple (SWCNTs). Cette substitution est motivée par plusieurs avantages inhérents aux SWCNTs, notamment leur abondance en carbone dans leur structure élémentaire, leur résilience mécanique remarquable, et leurs excellentes performances observées dans les cellules solaires organiques (OSC)[1-3]. Lorsqu'il s'agit de choisir une couche absorbante, deux critères majeurs prévalent ; en premier lieu, il est essentiel qu'elle puisse absorber efficacement l'ensemble du spectre solaire, de manière à exciter les électrons vers des niveaux d'énergie supérieurs. Deuxièmement, elle doit être apte à faciliter le transfert de ces électrons excités hors de la cellule solaire vers un circuit externe. [4-6]. Récemment, les pérovskites et les matériaux organiques ont été suggérés comme de nouveaux candidats prometteurs en tant que semi-conducteurs pour augmenter la puissance des cellules solaires. [7]. En ce qui concerne les semi-conducteurs organiques, les SWCNTs présentent des propriétés électriques et optiques uniques. Cela, ouvre des perspectives prometteuses pour les futurs dispositifs nanoélectroniques, optoélectroniques et les technologies de récupération d'énergie englobent une gamme variée d'applications, telles que les cellules solaires, les diodes électroluminescentes, les écrans tactiles et les transistors [8,9] ils présentent également une conductivité élevée et une permittivité relative faible [10].

En ce qui concerne l'élaboration et le dépôt des nanotubes de carbone divers processus simples ont déjà été découvert par de nombreuses études de recherche, parmi lesquelles la pulvérisation par ultrasons. [11], Revêtement rotatif, revêtement par immersion, revêtement par pulvérisation, méthode sol-gel, filtration sous vide, dépôt par pulvérisation cathodique, technologie de dépôt couche par couche (LBL), dépôt par vapeur chimique, etc[12-14]

Cette partie de notre travail consiste à simuler une nouvelle structure à hétérojonction SWCNTs/SnS₂ respectueuse de l'environnement. Pour réaliser nos simulations, nous avons choisi d'optimiser la couche absorbante SWCNTs de type P en utilisant le logiciel SCAPS-1D. Ce programme nous a permis d'obtenir les paramètres de sortie d'une cellule solaire tels que la tension en circuit ouvert, la densité du courant

de court-circuit, le facteur de forme et le rendement de conversion. Pour vérifier les performances photovoltaïques et obtenir les meilleurs résultats, Ce chapitre examine comment les performances de la cellule étudiée sont affectées par divers paramètres, tels que l'épaisseur, la densité de dopage, l'énergie de gap et la température de fonctionnement.

IV.2. Motivation de l'utilisation des SWCNTs comme couche absorbante.

Les nanotubes de carbone à monoparoi (SWCNTs), également appelés « Single-walled carbon nanotubes » en anglais, ont suscité un intérêt considérable dans le domaine de photovoltaïque. En raison de leurs remarquables propriétés d'absorption photonique sur une plage étendue, allant de l'infrarouge à l'ultraviolet [10], les nanotubes de carbone démontrent une capacité accrue à absorber la lumière de manière plus efficace [16]. Cette caractéristique résulte de leur structure électronique distinctive, favorisant une interaction adaptée avec des photons de diverses énergies [17]. La partie cruciale d'une cellule solaire réside dans le matériau présent dans sa couche absorbante, responsable de capter la lumière solaire et de la convertir en énergie électrique. Cela a incité les chercheurs à examiner leur potentiel en tant que couche semi-conductrice de type P dans la structure de la cellule solaire. Dans cette section, nous présenterons les motivations derrière l'utilisation des SWCNTs comme matériau absorbant, en nous appuyant sur des études scientifiques tirées de la littérature spécialisée. Nous discuterons les avantages inhérents des nanotubes de Carbone dans l'amélioration des performances des cellules photovoltaïques et nous fournirons un aperçu des avancées récentes réalisés dans ce domaine.

Les nanotubes de carbone offrent des propriétés de transport de charge exceptionnelles, ce qui les rend extrêmement attrayants pour être utilisés en tant que couche active dans les cellules solaires [18]. Cette caractéristique revêt une importance fondamentale dans l'évaluation globale de l'efficacité d'une cellule solaire, car elle influence la collecte et le déplacement des porteurs de charge créés lors de l'absorption de la lumière [19]. Les SWCNTs présentent une diffusion limitée des porteurs pendant le transport et affichent une mobilité électronique exceptionnellement élevée, grâce à leur structure unidimensionnelle avec des défauts de réseau minimales. Cette haute mobilité facilite le déplacement rapide des porteurs de charge, à savoir les électrons et

les trous, au sein de la couche absorbante. Un transport efficace des charges réduit considérablement la probabilité de recombinaison des porteurs [20].

Les nanotubes de carbone à paroi unique (SWCNTs) possèdent une caractéristique fondamentale : leur capacité à ajuster directement leur bande interdite [21,22]. Ces structures sont essentiellement des feuilles de graphène enroulées dans une dimension presque unique [23]. Du fait de leur diamètre et de leur enroulement, les SWCNTs prennent diverses chiralités, chacune ayant une énergie de bande interdite spécifique. Cette caractéristique permet de régler leur bande interdite pour correspondre au spectre solaire [21,23], ce qui les rend particulièrement prometteurs pour les absorbeurs de cellules solaires à semi-conducteurs.

Une étude intitulée "Les nanotubes de carbone pour la photovoltaïque : du laboratoire à l'industrie", menée par Laura Wieland et ses collègues [24], met en lumière l'importance de cette capacité des SWCNTs à ajuster leur bande interdite. Cette propriété offre la possibilité d'optimiser l'efficacité des cellules solaires en adaptant précisément leur réponse au spectre solaire [25]

On peut trouver dans la littérature que les nanotubes de carbone à simple paroi (SWCNT) sont utilisés en combinaison avec divers matériaux dans le but d'améliorer l'efficacité des cellules solaires : dans une étude [26], Rajanna, P. M. et ses collègues ont suggéré l'utilisation de cellules solaire à hétérojonction hybride basées sur des nanotubes de carbone à monoparoi et du silicium amorphe, où trois cellules solaires hybrides à hétérojonction ont été fabriquées en utilisant MoO_x sur SWCNTs/Si, SnCl₂ sur SWCNTs/Si et à la fois MoO_x et SnCl₂ sur SWCNTs/Si. Les résultats obtenus de l'étude ont montré une efficacité maximale de 8.2 % en utilisant à la fois MoO_x et SnCl₂ sur la cellule solaire SWCNTs/Si. Dans un autre travail [27], les rendements des cellules SWCNTs/Si sont passés de 10 % à 17 %.

En outre, les SWCNTs ont été aussi associés au CdTe pour former un contact arrière transparent dans les cellules solaires au CdTe [28][29]. Les réseaux de SWCNTs forment un contact transparent qui est différent des oxydes conducteurs transparents traditionnels (TCO). Ils présentent une transparence significativement plus élevée dans le proche infrarouge (NIR) que les TCO, ce qui les rend très utiles dans les cellules solaires en tandem à couches minces. Les SWCNT peuvent être intégrés dans les dispositifs à jonction unique et dans les cellules supérieures pour les dispositifs en

tandem à couches minces empilées mécaniquement [28]. En 2022 un nouveau modèle numérique référencée [30] a été développé pour un dispositif de cellule solaire tandem 2T utilisant des nanotubes de carbone à bande interdite étroite, représentant ainsi une avancée significative dans la technologie des couches minces photovoltaïques. L'étude a utilisé une sous-cellule inférieure composée de nanotubes de carbone à paroi unique (SWCNTs), démontrant une densité de courant intéressante et correspond à la cellule supérieure. Les résultats suggèrent que l'intégration des SWCNTs dans la sous-cellule inférieure entraîne une amélioration notable de l'efficacité de la cellule solaire, avec une augmentation d'environ 35%.

En 2023 une récente étude référencée [25], a montré que l'incorporation des nanotubes de carbone à paroi unique (SWCNTs) en tant que matériau de transport des trous, en association avec l'indium dans le matériau absorbeur pérovskite KSnCl_3 inorganique pour les cellules solaires, a démontré une capacité potentielle à accroître l'efficacité globale de la cellule solaire jusqu'à 36.82%.

De plus, les matériaux à base de carbone peuvent être extraits à partir de biomasse, ce qui en fait une alternative durable et respectueuse de l'environnement pour les cellules solaires. Ce processus implique de chauffer de la biomasse en présence d'eau pour produire un matériau riche en carbone pouvant être converti en SWCNTs. Cette méthode est relativement simple et peut être réalisée avec un équipement peu coûteux, ce qui en fait une approche prometteuse pour la production à grande échelle de SWCNTs [31, 32].

En raison des nombreux avantages qu'offrent les nanotubes de carbone à paroi unique (SWCNT), dans ce chapitre nous proposons une solution consistant à substituer le matériau CIGS par les SWCNT au sein de la structure de la cellule solaire. Cette initiative se profile comme une voie très prometteuse, susceptible non seulement de réduire substantiellement les coûts associés à la production de cellules solaires, mais également de résoudre les problèmes de toxicité qui sont inhérents au matériau CIGS. De plus, elle ouvre la voie au développement de cellules solaires plus performantes et durables, ce qui représente une avancée cruciale pour l'avenir de l'énergie solaire.

IV.3. Présentation de la cellule à base de SWCNTs

La figure IV.1 illustre la configuration de la cellule photovoltaïque Mo/SWCNTs/SnS₂/AZO/Al, composée des couches suivantes : Mo en tant que couche de contact arrière, SWCNTs en tant que couche d'absorption, SnS₂ en tant que couche de transport d'électrons, AZO en tant que couche fenêtre, et Al en tant que contact avant.

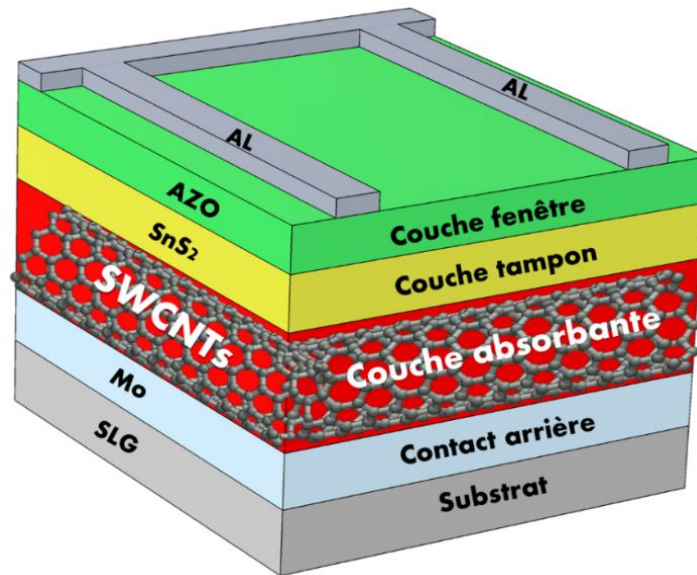


Figure IV. 1 : Cellule solaire à base du matériau organique SWCNTs

Tableau IV. 1: Paramètres physiques de la cellule solaire à base de matériau organique SWCNTs.

Propriétés des matériaux	Unités	SWCNTs(p)	SnS ₂ (n)	AZO(n)
Epaisseur	μm	1.5-4	0.05 [33]	0.06 [35]
Energie de gap E _g	eV	0.95 [30]	1.85 [33]	3.4 [36]
Affinité électronique χ	eV	4.27 [30]	4.26 [33]	4.5 [37]
Permittivité relative ε	-	3.4 [30]	17.7 [33]	9 [38]
Densité d'états effective dans la BC N _c	cm ⁻³	5×10 ¹⁶ [30]	7.32×10 ¹⁸ [33]	2.2×10 ¹⁸ [38]
Densité d'états effective dans la BV N _v	cm ⁻³	6×10 ¹⁷ [30]	1.8×10 ¹⁹ [12]	1.8×10 ¹⁹ [38]
Vitesse thermique V _{thn} /V _{thp}	cm/s	1×10 ⁷ [30]	1×10 ⁷ [33]	1×10 ⁷ [38]
Electron mobility μ _n	cm ² /Vs	80000 [30]	50 [33]	100 [38]
Hole mobility μ _p	cm ² /Vs	2000 [30]	25 [33]	25 [38]
Densité de dopage N _D	cm ⁻³	0	9.85×10 ¹⁸ [33]	1×10 ¹⁸ [38]
Densité de dopage N _A	cm ⁻³	4×10 ¹⁴ [25]	0	0
Densité de défauts N _t	cm ⁻³	1×10 ¹⁴ [6]	1×10 ¹⁶ [34]	3×10 ¹⁶ [39]

Nous avons intégré les paramètres caractéristiques de chaque couche dans le logiciel SCAPS, comme indiqué dans le tableau IV.1, puis nous avons analysé l'impact de la couche absorbante SWCNTs sur les performances globales de la cellule photovoltaïque.

IV.4. Optimisation de la Couche SWCNTs

IV.4.1. Effet de l'épaisseur de la couche absorbante sur les performances de la cellule

Nous avons modifié l'épaisseur de l'absorbant dans la plage de 1.5 à 4 μm , alors que tous les autres paramètres des couches de matériaux distinctes étaient maintenus à des valeurs constantes. Nous avons ensuite enregistré l'évolution des paramètres photovoltaïques en fonction de l'épaisseur de la couche active, présentant les résultats sous forme de courbes, comme illustré sur la figure IV. 2.

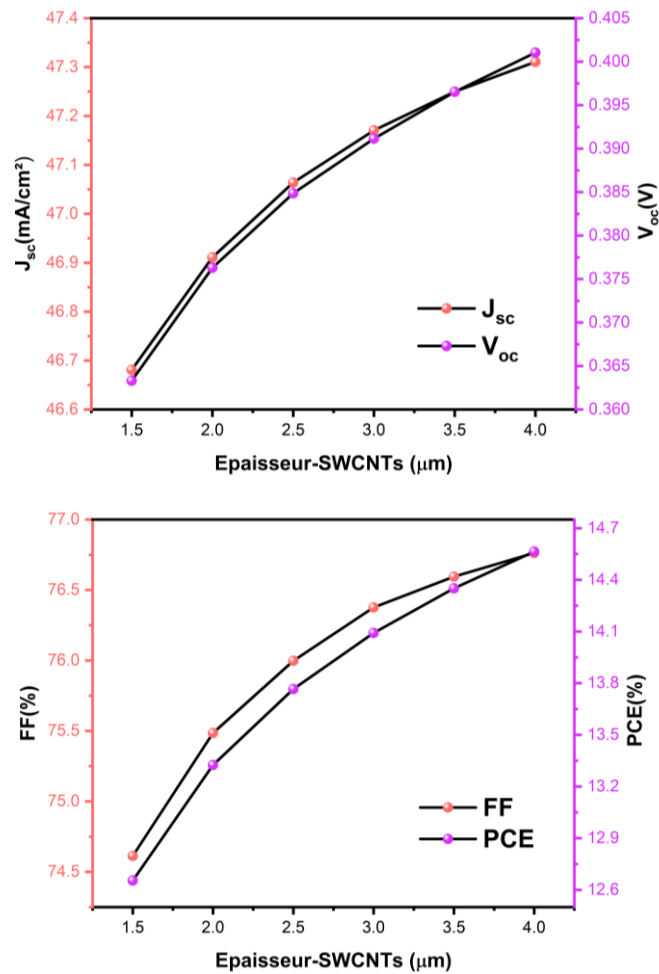


Figure IV. 2: Effet de l'épaisseur de la couche SWCNTs sur la performance du dispositif solaire. (a) Variation de V_{oc} et J_{sc} . (b) Variation FF et PCE

Selon les graphes présentés sur la figure ci-dessus, nous pouvons constater que lorsque l'épaisseur de la couche SWCNTs augmente, tous les paramètres photovoltaïques tels que la tension à circuit ouvert (V_{OC}), le courant de court-circuit (J_{SC}), le facteur de forme (FF) et le rendement de conversion énergétique (PCE) augmentent de manière significative. Cette observation peut être expliquée par la capacité accrue des nanotubes de carbone (SWCNTs) à absorber un plus grand nombre de photons de longueurs d'onde plus élevées lorsqu'ils présentent une plus grande largeur. En conséquence, un nombre accru de paires électron-trou est généré, ce qui se traduit par des améliorations notables de tous les paramètres photovoltaïques de la cellule [40,41]. La figure IV.3 illustre comment la variation de l'épaisseur de la couche absorbante impacte le taux de recombinaison ou la probabilité de recombinaison des porteurs de charge générés.

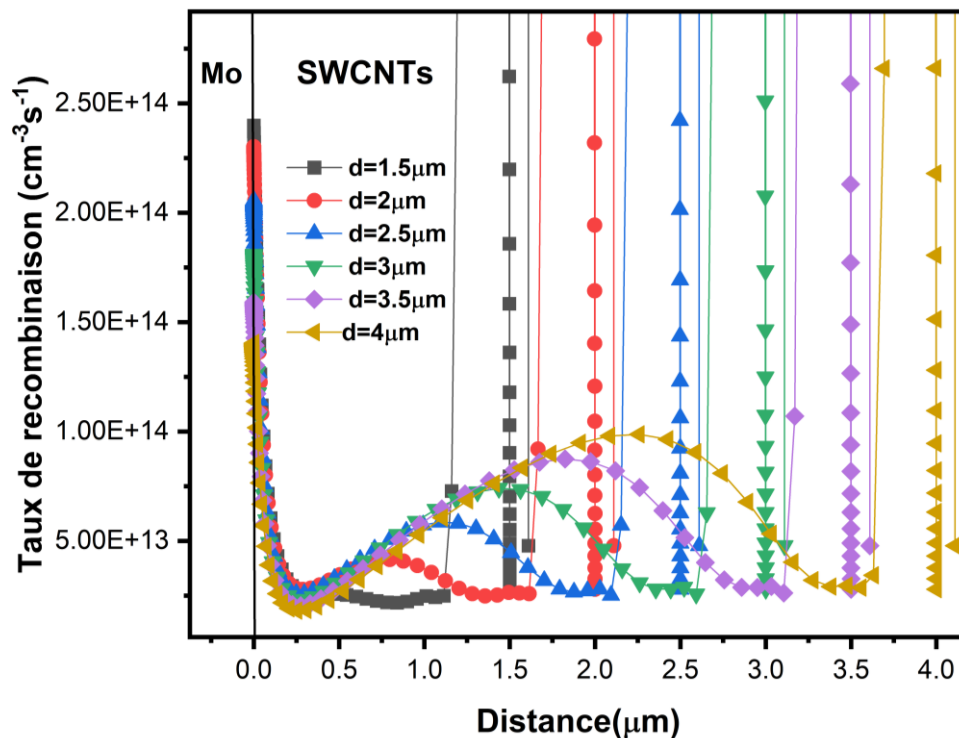


Figure IV. 3: Taux de recombinaison pour différentes valeurs de l'épaisseur de la couche SWCNTs

On observe une augmentation significative de ce taux près du contact arrière exactement au niveau de la jonction Mo/SWCNTs lorsque l'épaisseur de la couche absorbante est réduite, cette probabilité diminue à mesure que l'épaisseur de la couche absorbante augmente. L'accroissement de l'épaisseur des nanotubes de carbone, favorise l'absorption des photons, conduisant ainsi une augmentation du rendement de conversion et de la densité de courant de court-circuit [42,30]. À une épaisseur de 4

μm , le dispositif simulé a présenté un PCE de 14.56 %, accompagné d'une valeur notable de J_{sc} , atteignant 47.31 mA/cm^2 . De plus, cette valeur de densité de courant de court-circuit est corrélée à un V_{oc} de 0.4 V et à un FF de 76.76 %. Nous avons émis l'hypothèse que cette amélioration était attribuable aux nanotubes de carbone à simple paroi (SWCNT) eux-mêmes, en raison de leur mobilité accrue des porteurs. [6,43]

IV.4.2. Effet du dopage N_A de la couche SWCNTs sur les performances de la cellule

Nous avons également examiné l'influence de la densité de dopage de la couche absorbante sur les performances de la cellule. Nous avons maintenu l'épaisseur de cette couche à sa valeur optimale précédemment déterminée ($4 \mu\text{m}$) tout en variant la densité de dopage, N_A , de 1×10^{12} à $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Nous avons ensuite tracé les variations des paramètres PV en fonction de la densité de dopage. La figure IV.4 montre les graphes résultants.

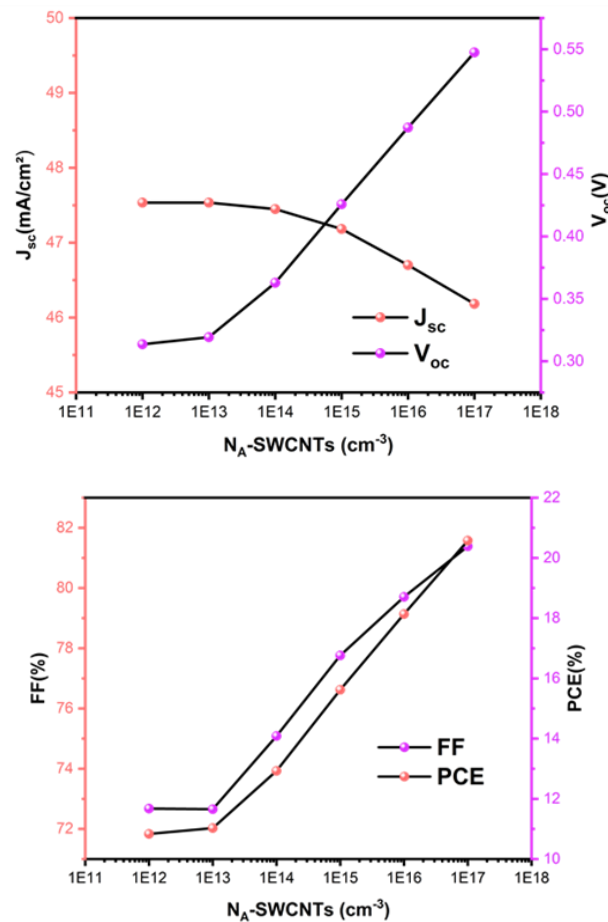


Figure IV. 4: Effet de la densité de l'accepteur SWCNTs sur la performance du dispositif solaire. (a) Variation de V_{oc} et J_{sc} . (b) Variation FF et PCE

À partir des graphiques ci-dessus, nous pouvons observer que l'augmentation de la densité de dopage dans la couche active SWCNTs entraîne une légère diminution du courant de court-circuit (J_{SC}) de 47.53 à 46.18 mA/cm². En revanche, les trois autres paramètres photovoltaïques (V_{OC} , FF, PCE) augmentent de manière significative. Le V_{OC} passe de 0.31 à 0.55, le FF de 72.67 à 81.39 % et le PCE augmente rapidement de 10.83 à 20.58 %. Ces résultats indiquent que l'augmentation du dopage entraîne un champ électrique plus élevé, favorisant ainsi une meilleure collecte des porteurs photogénérés. La figure IV.5 présente le champ électrique pour différentes valeurs de dopage N_A .

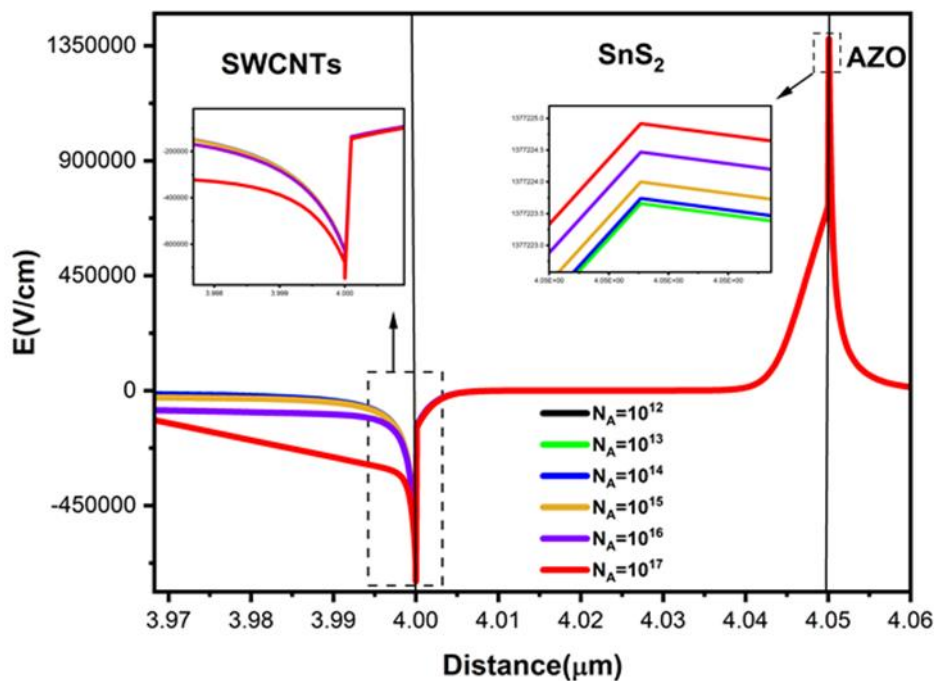


Figure IV. 5: Champ électrique pour différentes valeurs de dopage N_A de la couche SWCNTs

Il est remarquable qu'au niveau des deux interfaces des différentes jonctions, à savoir SWCNTs/SnS₂ et SnS₂/AZO, le champ électrique est très important lorsque le dopage atteint 1×10^{17} cm⁻³. En revanche, avec l'augmentation de la concentration des porteurs accepteurs de la couche SWCNTs, la durée de vie des électrons photogénérés diminue, entraînant ainsi une réduction de la collecte de porteurs à l'interface et une diminution de la valeur de J_{sc} en raison d'une augmentation de la recombinaison entre les porteurs de charge présents dans la cellule photovoltaïque [6]. Afin d'appuyer notre interprétation, nous avons tracé sur la figure IV.6 le taux de recombinaison au niveau de la cellule pour différentes valeurs de densité de dopage.

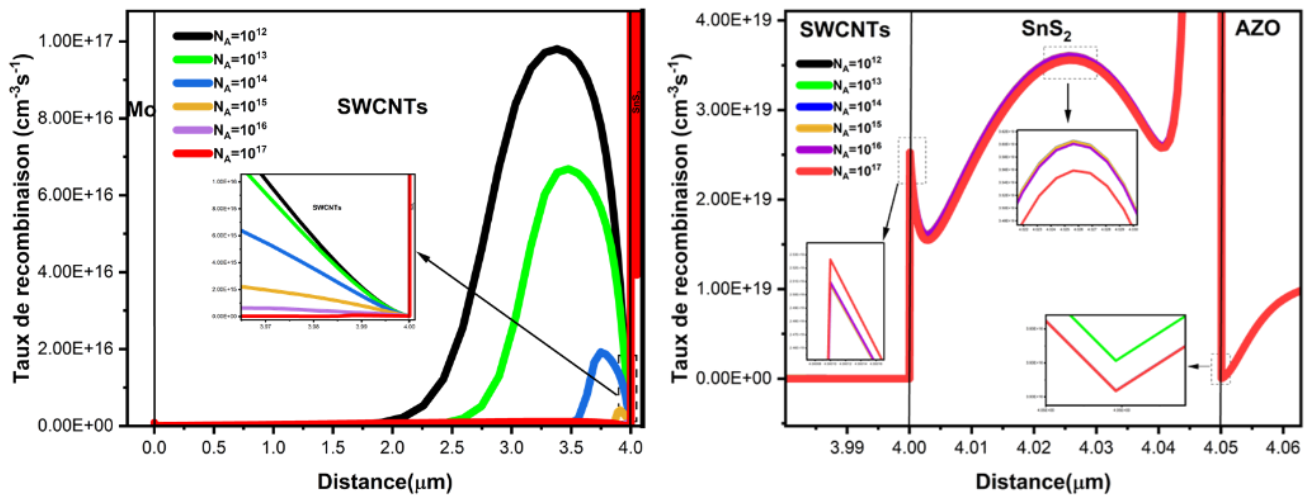


Figure IV. 6 : Taux de recombinaison pour différentes valeurs de dopage de la couche SWCNTs

Il est clairement observable qu'une augmentation de la densité de dopage entraîne une élévation du taux de recombinaison à l'interface de la jonction SWCNTs/SnS₂. Cependant, au niveau des deux couches SWCNTs et SnS₂ ainsi qu'au niveau de la jonction SnS₂/AZO, le taux de recombinaison diminue lorsque la densité de dopage augmente. Cela est dû au champ électrique induit dans la cellule, qui devient très intense à des densités de dopage plus élevées, ce qui améliore les performances de la cellule photovoltaïque ; En outre, le dopage de type p peut augmenter la conductivité des nanotubes de carbone [44], notamment lorsque $N_A=1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, une valeur considérée comme optimale dans notre étude, ainsi que dans la littérature [6,30].

IV.4.3. Effet de l'énergie de gap E_g de la couche SWCNTs sur les performances de la cellule

Pour examiner l'influence de l'énergie de bande interdite de la couche active SWCNTs sur les performances de la cellule, nous avons maintenu une épaisseur de 4 μm et une densité de dopage de $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ comme valeurs optimales, tout en variant l'énergie de bande interdite de 0.9 à 1.5 eV. La figure IV.7 illustre l'évolution des paramètres photovoltaïques en fonction de la largeur du gap énergétique.

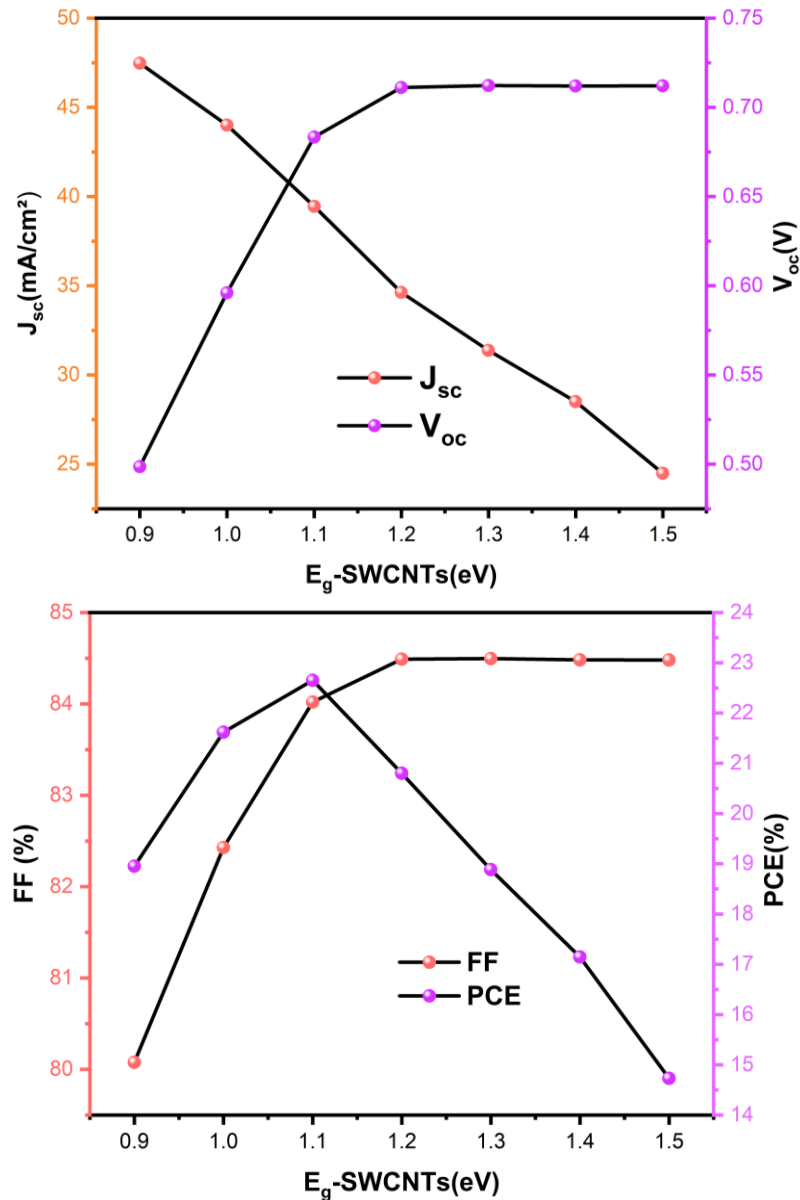


Figure IV. 7: Effet de l'énergie de gap de la couche SWCNTs sur la performance du dispositif solaire. (a) Variation de V_{oc} et J_{sc} . (b) Variation FF et PCE.

Nous observons que l'augmentation du gap énergétique de 0.9 à 1.5 eV entraîne les résultats suivants : une augmentation de la tension en circuit ouvert (V_{oc}) de 0.50 à 0.71 V, ainsi qu'une augmentation du facteur de forme (FF) de 80.08 à 84.48 %. Cependant, cela s'accompagne d'une diminution de la densité de courant de court-circuit (J_{sc}) de 47.47 à 24.49 mA/cm². Il augmente de 0.9 eV jusqu'à un gap de 1.1 eV, atteignant un pic de 22.65 %. Au-delà de cette valeur, le rendement diminue à mesure que le gap augmente. Sur la figure IV.8, nous avons présenté les variations du champ électrique pour les différentes valeurs de gap.

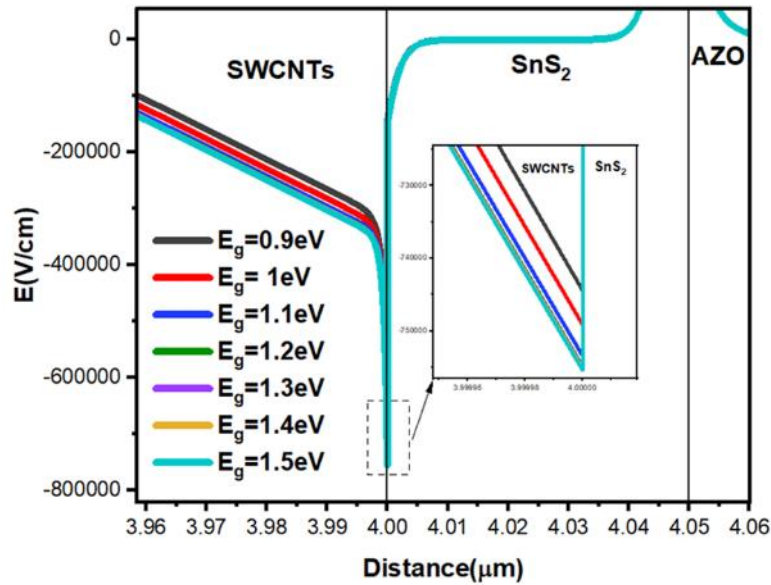


Figure IV. 8: Champ électrique pour différentes valeurs de gap de la couche SWCNTs

Nous pouvons remarquer une corrélation entre l'augmentation du gap et celle du champ électrique ; Le champ électrique élevé à l'interface, exerce une force sur les électrons de la bande de conduction dans l'absorbeur SWCNT de type p vers l'ETL, réduisant ainsi la recombinaison et favorisant leur collecte. Ce qui se traduit par une amélioration notable du Voc et du FF au sein de la cellule solaire. Cela a été noté dans l'article référencé [6]. Pour mieux comprendre, nous avons tracé le diagramme de bande d'énergie pour trois valeurs de gap ($E_g=0.9\text{eV}$, $E_g=1.1\text{eV}$ et $E_g=1.5\text{eV}$) sur la figure IV.9.

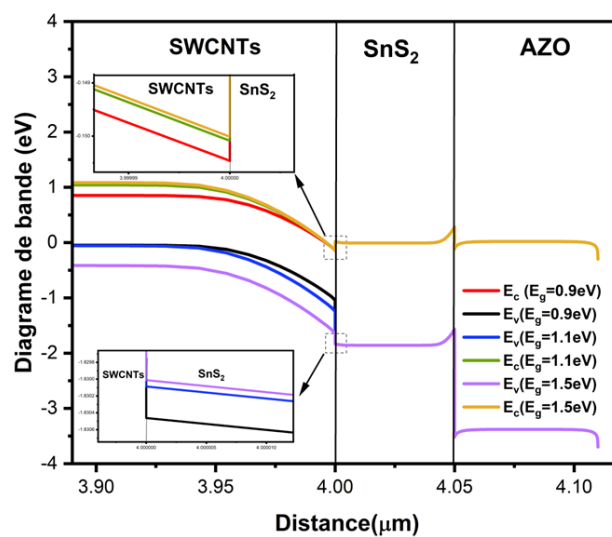


Figure IV. 9: Diagramme de bande d'énergie pour différentes valeurs de gap de la couche SWCNTs

Nous observons la diminution des barrières de bande avec le gap énergétique au niveau de l'interface SWCNTs/SnS₂, facilitant ainsi le transport des porteurs de charge au sein de la cellule solaire et les empêchent de se recombiner à l'interface comme illustré sur la figure IV.10 induisant un Voc et un FF plus important. Néanmoins, le rendement de conversion diminue au-delà de la valeur de 1.1eV où le Voc et FF sont quasi-constants alors que le Jsc diminue.

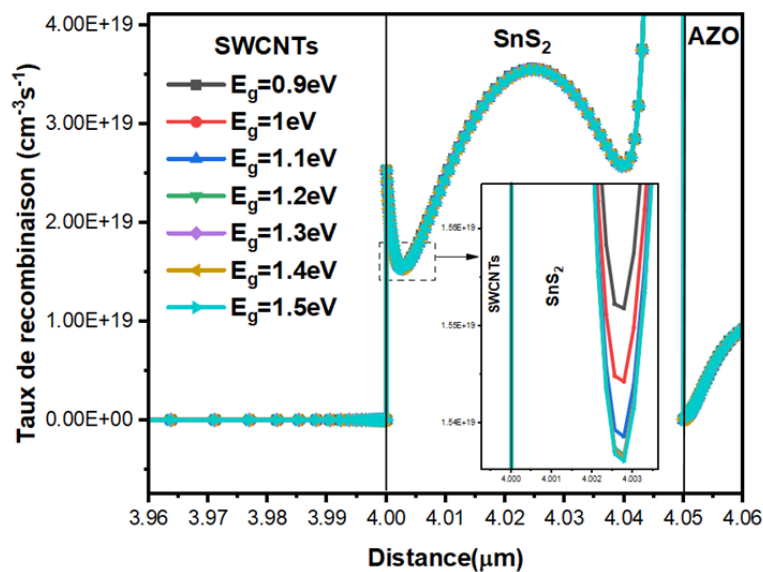


Figure IV. 10 : Taux de recombinaison pour différentes valeurs de gap de la couche SWCNTs

Pour mieux comprendre cette observation, nous avons établi sur la figureIV.11 le rendement quantique pour une variation de 1.1 à 1.5eV.

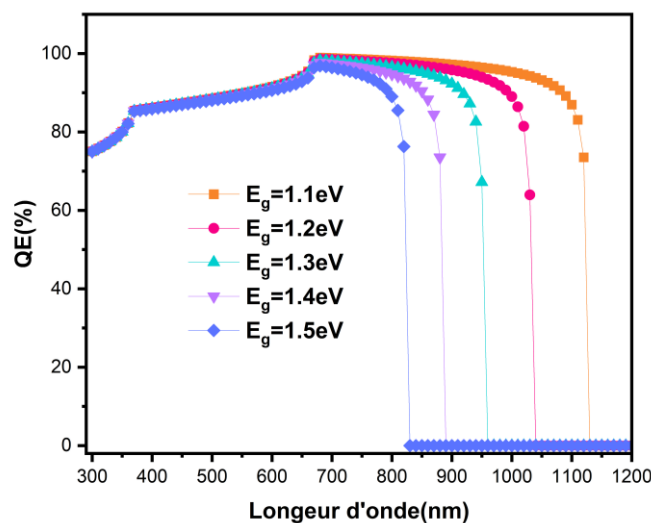


Figure IV. 11: Rendement quantique pour différentes valeurs de gap de la couche SWCNTs

Il est observable que le rendement quantique s'améliore remarquablement lorsque le gap énergétique est réduit du 1.5 à 1.1eV. Cela s'explique par le fait que les absorbeurs à large bande interdite ne captent pas efficacement les photons à longueurs d'onde élevées, ce qui se traduit par un faible nombre de porteur de charge photogénérés[45]. Par conséquent, une diminution du nombre de porteurs libres engendre une réduction du courant de court-circuit à travers l'ensemble de la cellule photovoltaïque [46]. De plus, pour un gap de 1.5eV, il est observé que l'absorption de la lumière est sensiblement réduite aux longueurs d'ondes supérieures à 830 nm, comme le montre la figure IV.11. Le coefficient d'absorption au sein des semi-conducteurs dépend considérablement de l'énergie des photons incidentes ou de leur longueur d'onde [45]. Dans un semi-conducteur, la lumière qui est inférieure au niveau d'absorption n'a pas assez d'énergie pour stimuler les électrons de la bande de valence à la bande de conduction, Ce photon n'est donc pas absorbé.

Par ailleurs, il est intéressant de noter que le rendement quantique de la cellule photovoltaïque s'améliore de manière significative lorsque le matériau présente un gap énergétique réduit de 1.1 eV. Cette constatation est particulièrement remarquable car elle est accompagnée d'un niveau de QE approchant les 100 % sur une plage étendue de longueurs d'onde allant de 700 à 1140 nm. Ces observations suggèrent une absorption plus efficace du rayonnement solaire par la cellule photovoltaïque dans cette gamme spectrale. De plus le rendement de conversion optimal est atteint lorsque le gap est égal à 1.1eV, ceci est en accord avec les résultats présentés dans les études de recherche similaire. [6,25] En outre, les SWCNTs de plus grand diamètre possèdent un gap important, ce qui rend le transfert des porteurs de charge plus difficile, par rapport aux nanotubes de petit diamètre donc d'un gap énergétique réduit [47]. Il est donc préférable d'utiliser diamètres de petite dimension.

IV.4.4. Effet de la température sur les performances de la cellule organique SWCNTs

La performance d'une cellule solaire est fortement influencée par sa température de fonctionnement. La température de fonctionnement utilisé pour la cellule solaire SWCNTs a été fixée de 300 K. Nous avons fait varier la température dans cette étude de 300 à 400 K. Comme le montre la figureIV.12, la température de fonctionnement affecte considérablement la performance des cellules solaires.

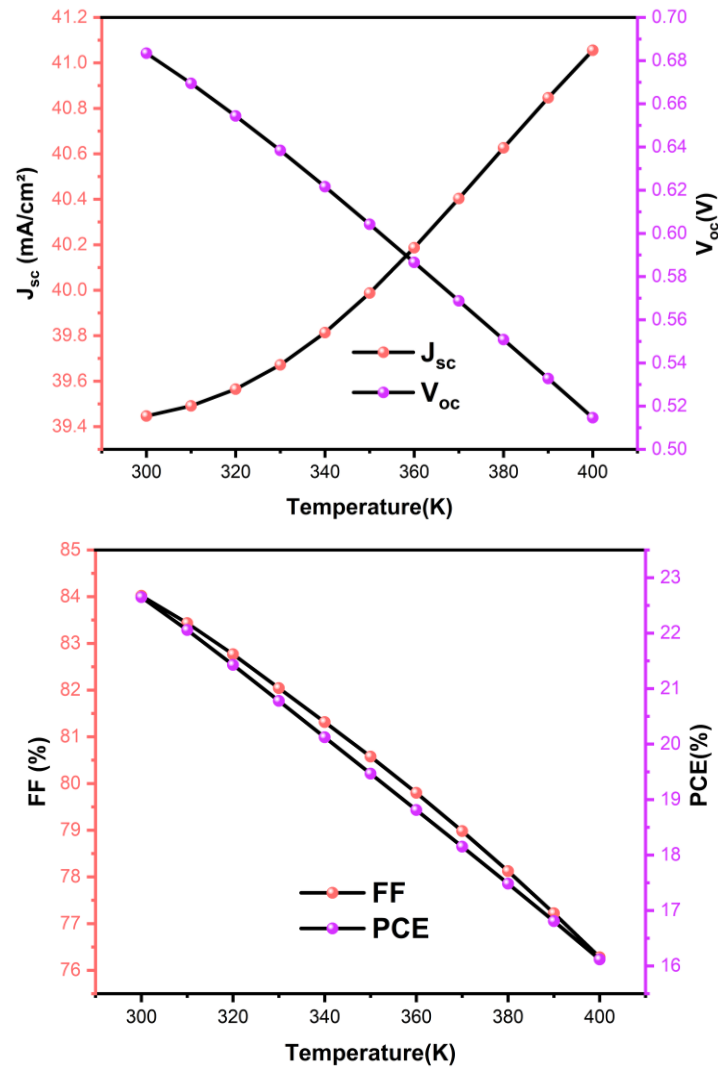


Figure IV. 12: Effet de la température sur les performances du dispositif solaire SWCNTs. (a) Variation de V_{oc} et J_{sc} . (b) Variation FF et PCE

Nous avons observé que l'élévation de la température de 300 à 400 K a un impact notable sur les caractéristiques d'un dispositif photovoltaïque. V_{oc} , J_{sc} et PCE présentent une même allure, à l'exception de J_{sc} [48].

On observe une légère augmentation du courant de court-circuit. Cela, peut être expliqué par une augmentation du courant de saturation inverse au niveau de la jonction p-n. [49,50] En outre, des études antérieures ont démontré que J_{sc} augmente proportionnellement à l'élévation de la température [51,52].

La réduction de la tension en circuit ouvert observée en corrélation avec l'accroissement de la température peut être expliquée par l'accroissement de la recombinaison des porteurs de charge à l'intérieur de la région de la jonction p-n [49,50]. Conformément à ce qui est illustré sur la figure IV.13. Lorsque la température

augmente, le taux de recombinaison au niveau de la jonction SWCNTs(p)/SnS₂(n) augmente, ce qui entraîne une diminution du Voc.

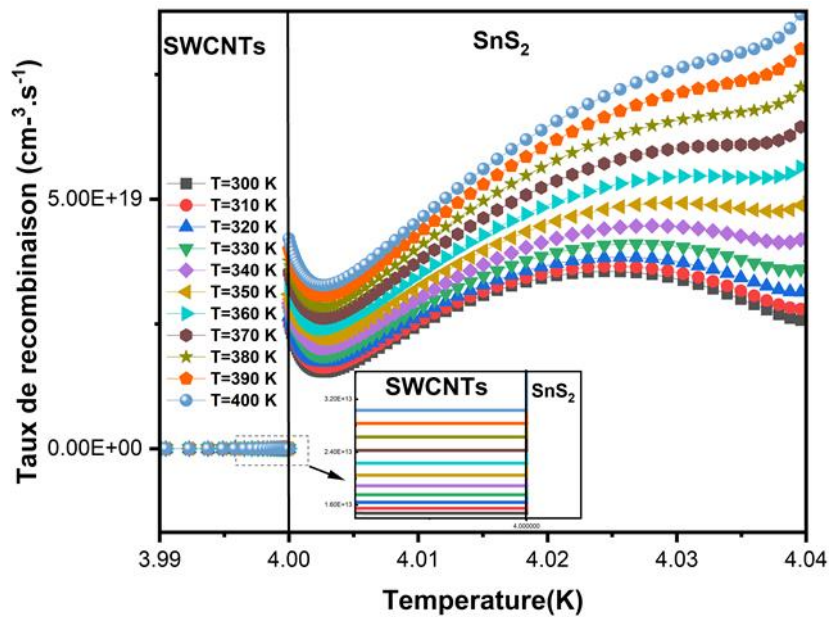


Figure IV. 13 : Taux de recombinaison pour différentes valeurs de température de la cellule SWCNTs

Une analyse de la figure IV.14 révèle une diminution du champ électrique à cette jonction avec l'élévation de la température. Ceci est en corrélation avec la diminution de la collecte des porteurs photogénérés au sein de la cellule SWCNTs.

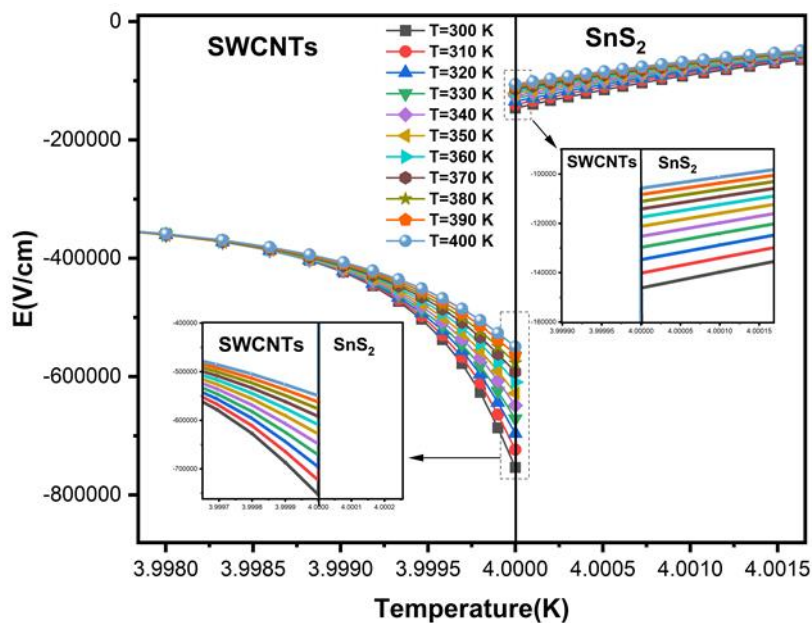


Figure IV. 14: Champs électrique pour différentes valeurs de température de la cellule SWCNTs

À mesure que la température augmente, la baisse de la qualité de la cellule indique une faible collecte, expliquée par un fort taux de recombinaisons. [48] La résistance interne de la cellule solaire peut augmenter, ce qui réduit le FF de la cellule [53,54]. Ce résultat est aussi en accord avec la référence [55].

Le rendement se définit comme le rapport entre la puissance maximale générée par la cellule et l'intensité lumineuse incidente comme indique l'équation I.15(chapitre I). Il est influencé par les variations du FF, c'est pourquoi nous constatons une diminution de rendement énergétique jusqu'à 16.12% pour une température élevée de 400K. De plus, l'énergie thermique des électrons augmente. La collision avec les atomes chauffés thermiquement diminue l'efficacité car les vibrations du réseau empêchent les porteurs libres de se déplacer librement. Par conséquent, la température de fonctionnement optimale pour la cellule solaire à base de SWCNTs est de 300K (STC)

IV.5. Comparaison des trois structures étudiées :

Les caractéristiques courant-tension (J-V) de trois structures différentes, à savoir Mo/SWCNTs/SnS₂/AZO/Al, Mo/CIGS/SnS₂/AZO/Al et Mo/SnS/CIGS/SnS₂/AZO/Al sont illustrées dans la figure IV.15 et les résultats sont résumés dans le tableau IV.2.

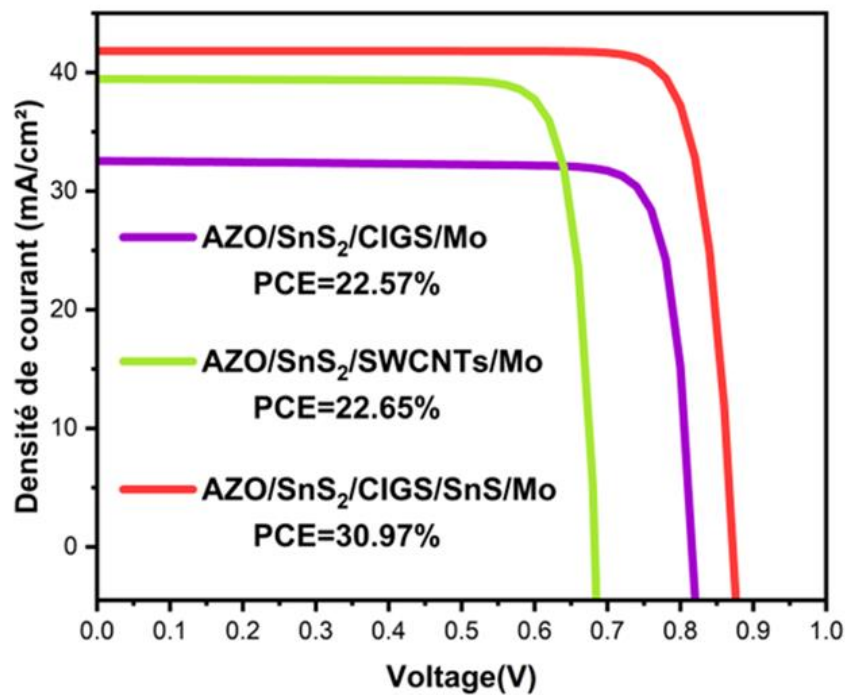


Figure IV. 15: Caractéristique J-V des trois différents structures

Tableau IV. 2: Résumé des résultats des trois différents structures après optimisation

Type de la cellule	Absorber Épaisseur(μm)	BSF Epaisseur(nm)	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm^2)	FF (%)	PCE (%)
Mo/SWCNTs/SnS ₂ /AZO/Al	4	-	0.69	39.45	84.48	22.65
Mo/CIGS/SnS ₂ /AZO/Al	1	-	0.82	32.54	84.70	22.57
Mo/SnS/CIGS/SnS ₂ /AZO/Al	1	40	0.87	41.81	84.89	30.97

Concernant la cellule solaire CIGS dotée de la couche BSF(SnS), nous avons pu obtenir un rendement de conversion remarquable d'environ 31 %, accompagné d'une densité de courant substantielle de 41.81 mA/cm², une meilleure tension de circuit ouvert approchant de 0.9 V avec un facteur de forme d'environ 84.90% en raison de l'inclusion de la couche BSF d'une épaisseur de seulement 40 nm et 1 μm de la couche CIGS.

Lorsque nous avons remplacé le matériau CIGS par des nanotubes de carbone à simple paroi (SWCNTs), nous avons constaté un rendement de conversion de l'énergie solaire de 22.65 %, accompagné d'une densité de courant considérable de 39.45 mA/cm², pour une épaisseur importante de 4 micromètres de la couche absorbante (SWCNTs). En comparaison, dans le cas de la cellule CIGS sans couche BSF(SnS), le rendement atteint 22.57 %, mais avec une faible densité de courant de 32.54 mA/cm², pour une épaisseur de couche absorbante (CIGS) de seulement 1 μm . La cellule solaire constituée de matériau SWCNTs présente une tension qui se rapproche de 0.7 V et un facteur de forme de 84.48% légèrement inférieur à celui de la cellule CIGS sans BSF, qui présente une tension de 0.82V et un FF de 84.70%, mais la toxicité du matériau CIGS a été évitée.

Pour valider cette amélioration, nous avons présenté des courbes d'efficacité quantique (EQ) pour les trois structures distinctes. Ces courbes couvrent une plage de longueurs d'onde s'étendant de 300 à 1200 nm, comme illustré sur la figure IV. 16.

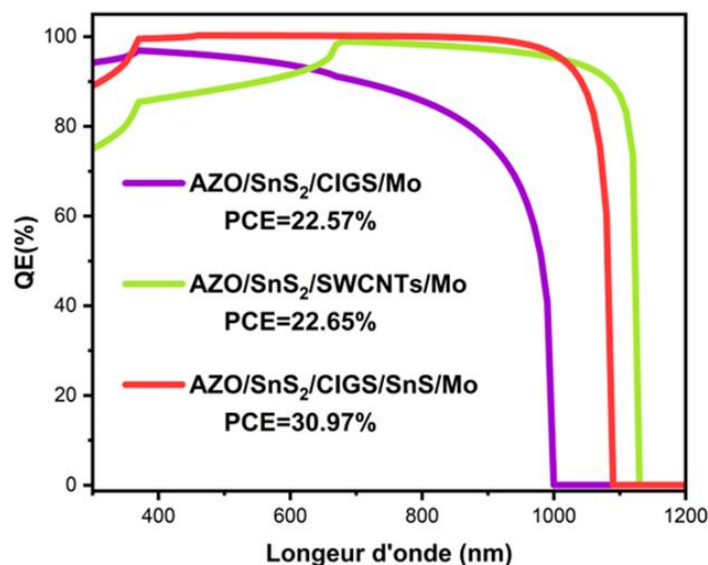


Figure IV. 16: Rendement quantique des trois différents structures

L'efficacité d'absorption des photons dépasse les 88 % dans les plages spectrales des ultraviolets, du visible et de l'infrarouge, suggérant ainsi une tendance très prometteuse pour les dispositifs de conversion photovoltaïque [25].

Les cellules solaire CIGS sans BSF(SnS) présentent un rendement quantique supérieur à 90% dans la plage de longueurs d'onde comprise entre 300nm et 600 nm. Au-delà de cette plage, le rendement commence à décroître progressivement, et au-delà de 1000 nm, le rendement quantique atteint zéro. En revanche, les cellules CIGS avec BSF(SnS) présentent un QE proche de 100% dans la plage de longueurs d'onde allant de 400 nm à 1000 nm. Au-delà de 1100 nm, le rendement quantique s'annule.

En comparaison, les cellules à base de matériaux organiques (SWCNTs), présentent des performances remarquables, affichant un QE dépassant les 80% dans la plage de longueurs d'onde de 400 à 700 nm (il est à noter que pour ces longueurs d'onde, l'absorption des photons, par le SWCNTs, est plus faible que pour les deux autres structures). Cependant, il convient de noter que sur une plage de longueurs d'onde allant de 700 à 1150 nm, les nanotubes de carbone à simple paroi présentent un rendement quantique nettement supérieur à celui de la cellule CIGS sans BSF(SnS). En particulier, la longueur d'onde de 1150 nm se distingue par un rendement quantique supérieur à celui de la cellule CIGS avec et sans BSF.

Les SWCNTs possèdent une excellente transparence optique sur une large gamme de longueurs d'onde (de l'ultraviolet au proche infrarouge) et sont capables d'absorber

des photons d'une plage de 300 à 1150 nm. De plus, il est possible que ces nanotubes de carbone à simple paroi puissent générer des émissions même à des longueurs d'onde de 1800 nm [56,57]. Cette propriété rend les SWCNTs particulièrement attrayants pour une utilisation dans les applications photovoltaïques, car ils contribuent à une efficacité quantique externe élevée dans la région proche infrarouge [58,59]. Ceci est dû à la vaste surface spécifique des nanotubes de carbone, qui peut accroître l'efficacité de la conversion de la lumière en énergie électrique [60].

IV.6. Comparaison des résultats (Simulation /Expérimentale)

Le tableau IV.3 présente une synthèse des réalisations des nanotubes de carbone au cours des années précédentes, qu'il s'agisse de simulation ou d'expériences. Cependant, en 2013, le matériau SWCNTs a été utilisé comme semi-conducteur de Type n, démontrant un rendement de 10.40% [61]. Il a également été utilisé comme couche absorbante semi-conductrice de type P dans plusieurs travaux. Dans un travail de simulation utilisant une structure ITO/CdS/P-SWCNTs/Mo, le rendement maximal a été trouvé en 2022[6], avec une efficacité de conversion de puissance PCE= 22.35%

Tableau IV. 3: Comparaison des caractéristiques photovoltaïques.

Structures	Type du travail	V _{oc} (V)	J _{sc} (mA)	FF (%)	PCE (%)	Références
ZnO-SWCNTs	Experimental	0.21	8.69	3.78	0.68	[61]
SnCl ₂ @SWCNTs/n-Si	Experimental	0.44	43	0.38	7.12	[41]
MoOx@SWCNTs/n-Si	Experimental	0.23	104	0.32	7.53	[41]
MoOx +SnCl ₂ @SWCNTs/n-Si	Experimental	0.26	108	0.29	8.20	[41]
SWCNT/TiO ₂ (core/shell)/MAPbI ₃ /Spiro-Ome-TAD/Au	Experimental	0.64	24.70	0.71	11.24	[62]
TiO ₂ /acid-doped SWCNT/Si	Experimental	0.61	32	77	15.1	[63,64]
MoOx-coated SWCNT/Si	Experimental	0.59	36.6	78	17	[63,65]
Mo/CIGS/n-SWCNTs/ZnO/ITO	Simulation	0.64	-29.0	0.56	10.40	[66]
SWCNT/n-GaAs	Simulation	-	-	-	17.1	[67]
Mo/P-SWCNTs /CdS/ITO	Simulation	0.63	42.66	82.84	22.35	[6]
Mo/SWCNTs/SnS ₂ /AZO	Simulation	0.69	39.45	84.48	22.65	Notre travail

Nos simulations ont démontré un rendement impressionnant de 22.65% lors de l'utilisation de la structure composée de AZO/SnS₂/P-SWCNTs/Mo. Notre avantage réside dans l'utilisation d'une couche tampon composée de SnS₂, un matériau non toxique, contraire au matériau CdS, connu pour sa nocivité. Cette recherche présente des avantages considérables pour l'environnement, en particulier en ce qui concerne l'amélioration du rendement, un aspect d'une grande importance pour les travaux futurs.

IV.7. Conclusion

Dans le dernier chapitre de notre étude, nous avons examiné l'influence de la couche absorbante composée de nanotubes de carbone à parois simples (SWCNTs). Notre objectif était de déterminer les paramètres optimaux associés à cette couche absorbante. Pour ce faire, nous avons réalisé des simulations visant à caractériser les performances d'une cellule solaire dotée de la structure suivante : SLG/Mo/SWCNTs/SnS₂/AZO/Al.

Nous avons entrepris une étude de simulation visant à évaluer l'influence des paramètres suivants de la couche active SWCNTs de type P : son épaisseur, sa densité de dopage et l'énergie de gap, sur plusieurs caractéristiques essentielles des cellules solaires. Ces caractéristiques comprennent la tension en circuit ouvert (V_{OC}), la densité de courant de court-circuit (J_{SC}), le facteur de forme (FF) et l'efficacité de la conversion d'énergie (PCE)

Notre étude a révélé qu'en augmentant l'épaisseur de la couche SWCNTs, il était possible de fixer l'épaisseur de l'absorbeur à 4 μm . Cette approche favorise un transport optimal des porteurs en minimisant leur recombinaison au niveau du contact arrière. Cela permet une meilleure efficacité énergétique et une réduction significative des pertes électriques liées aux mécanismes de recombinaison.

Nous avons démontré la nécessité d'augmenter le dopage de la couche active afin d'amplifier le champ électrique au sein des deux jonctions, à savoir SWCNTs/SnS₂ et SnS₂/AZO. Cette augmentation revêt d'une importance cruciale puisqu'elle favorise une importante collecte des porteurs de charge générés par l'effet photovoltaïque dans la cellule solaire.

L'optimisation de l'énergie de gap de la couche active SWCNTs a montré qu'il est impératif de trouver un équilibre optimal pour cette valeur. Elle ne doit pas être trop faible, afin d'obtenir à la fois un bon V_{OC} et un bon FF. D'un autre côté, cette énergie

de gap ne doit pas être trop élevée, car cela garantirait à la fois un J_{sc} satisfaisant et un PCE optimal, favorisant ainsi l'absorption maximale des photons énergétiques. Une énergie de bande interdite de 1.1 eV a démontré être optimale pour atteindre les meilleurs performances PV. En présence d'une barrière significative caractérisée par un gap de 1.1 eV, elle joue un rôle fondamental en favorisant le transfert efficace des électrons et des trous au sein de la cellule solaire SWCNTs.

La température optimale de fonctionnement se situe à 300K, car toute augmentation de la température jusqu'à 400K provoquera une dégradation de la cellule solaire. Cela est dû à l'augmentation du taux de recombinaison et à la diminution du champ électrique.

Nous pouvons tirer la conclusion que pour la couche active (ou absorbante) de la cellule solaire à nanotubes de carbone mono-parois (SWCNTs), les paramètres optimaux sont les suivants : Epaisseur = $4\mu\text{m}$, $N_A = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $E_g = 1.1 \text{ eV}$. Ces paramètres conduisent à un rendement maximal de la cellule solaire, qui atteint 22.65% à une température de 300 K.

Suite à notre analyse comparative entre les trois structures de cellules solaires : la cellule CIGS avec une couche (BSF), la cellule CIGS sans couche de (BSF) et la cellule a base SWCNTs sans couche de (BSF) :

Nous avons pu établir que la cellule solaire SWCNTs présente un rendement supérieur à la cellule CIGS sans BSF. Cependant, elle ne dépasse pas la performance de la cellule CIGS avec BSF. Cette observation est logique, car la couche BSF joue un rôle essentiel dans l'augmentation du rendement énergétique et la réduction des phénomènes de recombinaison au niveau de la face arrière de la cellule. Néanmoins, la cellule SWCNTs présente une longueur d'onde maximale de 1150 nm, se démarquant par son rendement quantique supérieur à celui de la cellule CIGS, que ce soit avec ou sans une couche de silicium arrière (BSF). Cela suscite un intérêt particulier pour l'incorporation d'une couche BSF au sein de la cellule SWCNTs, dans le but d'améliorer le rendement énergétique d'une hétérojonction SWCNTs/SnS₂, cette dernière étant reconnue pour sa non-toxicité environnementale.

Références:

- [1] Sharma, B., Mathur, A. S., Singh, I. K., & Singh, B. P. Performance optimization of non-fullerene acceptor organic solar cell by incorporating carbon nanotubes as flexible transparent electrode. *Results in Optics*, 9, 100315. (2022).
- [2] Darvishzadeh, P., Sohrabpoor, H., & Gorji, N. E. Numerical device simulation of carbon nanotube contacted CZTS solar cells. *Optical and Quantum Electronics*, 48, 1-6. (2016).
- [3] Cataldo, S., Salice, P., Menna, E., & Pignataro, B. Carbon nanotubes and organic solar cells. *Energy & Environmental Science*, 5(3), 5919-5940. (2012).
- [4] Ghobadi A, Yousef M, Minbashi M, Kordbacheh AHA, Abdolvahab AH, Gorji NE Simulating the effect of adding BSF layers on Cu₂BaSnS₃ thin film solar cells. *Opt Mater* 107:109927. (2020)
- [5] Bae SH, Zhao H, Hsieh YT, Zuo L, De Marco N, Rim YS, Li G, Yang Y Printable solar cells from advanced solution-processible materials. *Chem* 1:197– 219. (2016)
- [6] Oublal, E., Ait Abdelkadir, A., & Sahal, M. High performance of a new solar cell based on carbon nanotubes with CBTS compound as BSF using SCAPS-1D software. *Journal of Nanoparticle Research*, 24(10), 202. (2022).
- [7] Meher SR, Balakrishnan L, Alex ZC Analysis of Cu₂ZnSnS₄/CdS based photovoltaic cell: a numerical simulation approach. *Superlattices Microstruct* 100:703– 722. (2016)
- [8] Wang S, Zhang L, Zhang Z, Ding L, Zeng Q, Wang Z, Liang X, Gao M, Shen J, Xu H, Chen Q, Cui R, Li Y, Peng LM Photovoltaic effects in asymmetrically contacted CNT barrier-free bipolar diode. *J Phys Chem C* 113:6891–6893. (2009)
- [9] Wang, F., & Matsuda, K. Applications of carbon nanotubes in solar cells. In *Nanocarbons for energy conversion: supramolecular approaches* (pp. 497-536). Springer, Cham. (2019).
- [10] Pradhan B, Batabyal SK, Pal AJ. Functionalized carbon nanotubes in donor/acceptor-type photovoltaic devices. *Appl Phys Lett* 88:1–4. (2006)
- [11] Yang, Y., Chen, H., Zheng, X., Meng, X., Zhang, T., Hu, C., ... & Yang, S. Ultrasound-spray deposition of multi-walled carbon nanotubes on NiO nanoparticles-embedded perovskite layers for high-performance carbon-based perovskite solar cells. *Nano Energy*, 42, 322-333. (2017).
- [12] Sgobba, V., & Guldi, D. M. Carbon nanotubes as integrative materials for organic photovoltaic devices. *Journal of Materials Chemistry*, 18(2), 153-157. (2008).
- [13] Khan D, Ali Z, Asif D, Kumar Panjwani M, Khan I. Incorporation of carbon nanotubes in photoactive layer of organic solar cells. *Ain Shams Eng J* 12:897–900. (2021).
- [14] Khan D, Tan ZA, Khan I, Panjwani MK. A review of the challenges and possibilities of using carbon nanotubes in organic solar cells. *Sci Adv Mater* 10:747–760. (2018).
- [15] Brady, Gerald J., et al. "Quasi-ballistic carbon nanotube array transistors with current density exceeding Si and GaAs." *Science advances* 2.9 e1601240. (2016):
- [16] Lee, H., Kim, H. S., Gong, O. Y., Kim, J. Y., Kim, J. H., Choi, J. S., ... & Choi, T. Enhanced ferroelectric photovoltaic effect in semiconducting single-wall carbon nanotube/BiFeO₃ heterostructures enabled by wide-range light absorption and efficient charge separation. *Journal of Materials Chemistry A*, 8(20), 10377-10385. (2020).
- [17] D'Souza, F., & Ito, O. Photosensitized electron transfer processes of nanocarbons applicable to solar cells. *Chemical Society Reviews*, 41(1), 86-96. (2012)
- [18] Sukegawa, T., Sato, K., Oyaizu, K., & Nishide, H. Efficient charge transport of a radical polyether/SWCNT composite electrode for an organic radical battery with high charge-storage density. *RSC Advances*, 5(20), 15448-15452. (2015)
- [19] Jeon, I., Matsuo, Y., & Maruyama, S.. Single-walled carbon nanotubes in solar cells. *Single-Walled Carbon Nanotubes: Preparation, Properties and Applications*, 271-298. (2018)
- [20] Habisreutinger, S. N., Noel, N. K., Larson, B. W., Reid, O. G., & Blackburn, J. L. Rapid charge-transfer cascade through SWCNT composites enabling low-voltage losses for perovskite solar cells. *ACS Energy Letters*, 4(8), 1872-1879. (2019)
- [21] Batmunkh, M., Biggs, M. J., & Shapter, J. G. Carbon nanotubes for dye-sensitized solar cells. *Small*, 11(25), 2963-2989. (2015)

- [22] Blackburn, J. L. Semiconducting single-walled carbon nanotubes in solar energy harvesting. *ACS Energy Letters*, 2(7), 1598-1613. (2017)
- [23] Oyibo, Gideon. The Photovoltaic Properties of Carbon Nanotube Network pn Diodes. Diss. 2022.
- [24] Wieland, L., Li, H., Rust, C., Chen, J., & Flavel, B. S. Carbon nanotubes for photovoltaics: from lab to industry. *Advanced Energy Materials*, 11(3), 2002880. (2021)
- [25] Ul Abdin, Z., Qasim, I., Malik, M. I., & Rashid, M. Experimental and numerical investigations on feasibility of inorganic KSnCl_3 perovskite absorber and SWCNT-HTL for solar cells. *Heliyon*, 9(4). (2023)
- [26] Rajanna, P. M., Lund, P. D., & Nasibulin, A. G. Hybrid heterojunction solar cells based on single-walled carbon nanotubes and amorphous silicon thin films. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Energy and Environment*, 11(1), e402. (2022)
- [27] Wadhwa, P., Liu, B., McCarthy, M. A., Wu, Z., & Rinzler, A. G. Electronic junction control in a nanotube-semiconductor Schottky junction solar cell. *Nano letters*, 10(12), 5001-5005. (2010)
- [28] Barnes, T. M., Wu, X., Zhou, J., Duda, A., Van De Lagemaat, J., Coutts, T. J., ... & Glatkowski, P. Single-wall carbon nanotube networks as a transparent back contact in CdTe solar cells. *Applied Physics Letters*, 90(24). (2007)
- [29] Khanal, R. R., Phillips, A. B., Song, Z., Xie, Y., Mahabadi, H. P., Dorogi, M. D., ... & Heben, M. J. Substrate configuration, bifacial CdTe solar cells grown directly on transparent single wall carbon nanotube back contacts. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 157, 35-41. (2016)
- [30] Oublal, E., Al-Hattab, M., Abdelkadir, A. A., & Sahal, M.. New numerical model for a 2T-tandem solar cell device with narrow band gap SWCNTs reaching efficiency around 35%. *Solar Energy*, 246, 57-65. (2022)
- [31] Mugadza, K., Stark, A., Ndungu, P. G., & Nyamori, V. O. Synthesis of carbon nanomaterials from biomass utilizing ionic liquids for potential application in solar energy conversion and storage. *Materials*, 13(18), 3945. (2020).
- [32] Xu, M. *Synthèse et caractérisation de catalyseurs acido-basiques par greffage covalent sur supports carbonés. Application dans le domaine de la valorisation de molécules bio-sourcées* (Doctoral dissertation, Université de Poitiers). (2019)
- [33] M. Haghghi, M. Minbashi, N. Taghavinia, D.-H. Kim, S.M. Mahdavi, and A.A. Kordbacheh, "A modeling study on utilizing SnS_2 as the buffer layer of CZT(S,Se) solar cells." *Solar Energy* 167, 165-171 (2018).
- [34] T. Pansuriya, R. Malani, and V. Kheraj, "Investigations on the effect of buffer layer on CMTS based thin film solar cell using SCAPS 1-D." *Opt. Mater.* 126, 112150 (2022).
- [35] H. Aissani, A. Helmaoui, and H. Moughli, "Numerical modeling of graded band-gap cigs solar cell for high efficiency." *Int. J. Appl. Eng. Res.* 12, 227-232 (2017).
- [36] K.R. Ngoy, A.K. Singh, T.-C. Jen, and A.M. Ali, "Numerical analysis of thin film $\text{Cu}_2\text{InGaSe}_4$ solar cells design." *Solar Energy* 225, 53-59 (2021).
- [37] N.E.I. Boukourt, S. Patanè, M. Adouane, and R. AlHammedi, "Numerical optimization of ultrathin CIGS solar cells with rear surface passivation." *Solar Energy* 220, 590-597 (2021).
- [38] T. AlZoubi, A. Moghrabi, M. Moustafa, and S. Yasin, Efficiency boost of CZTS solar cells based on double-absorber architecture: Device modeling and analysis. *Solar Energy* 225, 44-52 (2021).
- [39] V.C. Karade, J.S. Jang, D. Kumbhar, M. Rao, P.S. Pawar, S. Kim, K.S. Gour, et al., Combating open circuit voltage loss in Sb_2Se_3 solar cell with an application of SnS as a back surface field layer. *Solar Energy* 233, 435-445 (2022).
- [40] Li, Z., Kunets, V. P., Saini, V., Xu, Y., Dervishi, E., Salamo, G. J., ... & Biris, A. S. SnO_2 enhanced photovoltaic conversion of single wall carbon nanotube/n-silicon heterojunctions. *Applied Physics Letters*, 93(24) (2008).
- [41] Shafique, R., Latif, H., Sattar, A., & Shabbir, S. A. Effect of anti-reflecting layers on device performance of SWCNTs/Si hetero-junction hybrid solar cells. *Optical Materials*, 143, 114215(2023).
- [42] Li, Z., Saini, V., Dervishi, E., Kunets, V. P., Zhang, J., Xu, Y., ... & Biris, A. S. Polymer functionalized n-type single wall carbon nanotube photovoltaic devices. *Applied Physics Letters*, 96(3). (2010).

- [43] Wieland, L., Li, H., Rust, C., Chen, J., & Flavel, B. S. Carbon nanotubes for photovoltaics: from lab to industry. *Advanced Energy Materials*, 11(3), 2002880. (2021).
- [44] Castrucci, P. Carbon nanotube/silicon hybrid heterojunctions for photovoltaic devices. *Advances in nano research*, 2(1), 23. (2014).
- [45] Gray, J. L. The physics of the solar cell. *Handbook of photovoltaic science and engineering*, 2, 82-128. (2011)
- [46] Padilla, M., Michl, B., Thaidigsmann, B., Warta, W., & Schubert, M. C. Short-circuit current density mapping for solar cells. *Solar energy materials and solar cells*, 120, 282-288. (2014).
- [47] Bindl, D. J., Ferguson, A. J., Wu, M. Y., Kopidakis, N., Blackburn, J. L., & Arnold, M. S. Free carrier generation and recombination in polymer-wrapped semiconducting carbon nanotube films and heterojunctions. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 4(21), 3550-3559. (2013)
- [48] Kumar, Pankaj. "Carbon Nanotubes and Graphene in Photovoltaics." *Emerging Applications of Carbon Nanotubes and Graphene*. CRC Press. 131-159. (2023)
- [49] Islam, M. A., Al Rafi, J., & Uddin, M. A. Modeling and formation of a single-walled carbon nanotube (SWCNT) based heterostructure for efficient solar energy: Performance and defect analysis by numerical simulation. *AIP Advances*, 13(11). (2023)
- [50] Harris, J. M., Headrick, R. J., Semler, M. R., Fagan, J. A., Pasquali, M., & Hobbie, E. K. (Impact of SWCNT processing on nanotube-silicon heterojunctions. *Nanoscale*, 8(15), 7969-7977. (2016)
- [51] De Nicola, F., Salvato, M., Cirillo, C., Crivellari, M., Boscardin, M., Passacantando, M., ... & Castrucci, P. 100% internal quantum efficiency in polychiral single-walled carbon nanotube bulk heterojunction/silicon solar cells. *Carbon*, 114, 402-410. (2017)
- [52] Chakraborty, S., & Manik, N. B. Effect of COOH-functionalized SWCNT addition on the electrical and photovoltaic characteristics of Malachite Green dye based photovoltaic cells. *Journal of Semiconductors*, 35(12), 124004. (2014)
- [53] Qu, H., & Li, X. Temperature dependency of the fill factor in PV modules between 6 and 40 C. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 33(4), 1981-1986(2019).
- [54] Muchuweni, E., Mombeshora, E. T., Martincigh, B. S., & Nyamori, V. O. Recent applications of carbon nanotubes in organic solar cells. *Frontiers in Chemistry*, 9, 733552. (2022)
- [55] Hassan, M. K., Alqurashi, I. M., Salama, A. E., & Mohamed, A. F. Investigation the performance of PV solar cells in extremely hot environments. *Journal of Umm Al-Qura University for Engineering and Architecture*, 13(1-2), 18-26 (2022).
- [56] Van Bezouw, S., Arias, D. H., Ihly, R., Cambré, S., Ferguson, A. J., Campo, J., ... & Blackburn, J. L. Diameter-dependent optical absorption and excitation energy transfer from encapsulated dye molecules toward single-walled carbon nanotubes. *ACS nano*, 12(7), 6881-6894. (2018).
- [57] Saito, T., Ohshima, S., Okazaki, T., Ohmori, S., Yumura, M., & Iijima, S. Selective diameter control of single-walled carbon nanotubes in the gas-phase synthesis. *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, 8(11), 6153-6157. (2008)
- [58] Hirayama, K., Kitamura, M., Hamano, R., & Umemura, K. Stable Near-Infrared Photoluminescence of Single-Walled Carbon Nanotubes Dispersed Using a Coconut-Based Natural Detergent. *ACS omega*, 6(45), 30708-30715. (2021).
- [59] Yum, K., McNicholas, T. P., Mu, B., & Strano, M. S. Single-walled carbon nanotube-based near-infrared optical glucose sensors toward in vivo continuous glucose monitoring. *Journal of diabetes science and technology*, 7(1), 72-87(2013).
- [60] Kumar, S., Nehra, M., Kedia, D., Dilbaghi, N., Tankeshwar, K., & Kim, K. H. Carbon nanotubes: A potential material for energy conversion and storage. *Progress in energy and combustion science*, 64, 219-253. (2018)
- [61] Omar, A., Abdullah, H., Shaari, S., & Taha, M. R.. Characterization of zinc oxide dye-sensitized solar cell incorporation with single-walled carbon nanotubes. *Journal of Materials Research*, 28(13), 1753-1760. (2013)
- [62] Chen, Y., Shi, X., Zhou, D., Wei, H., Yang, G., Zhang, L., ... & Su, Y. Highly efficient SWCNT/GaAs van der Waals heterojunction solar cells enhanced by Nafion doping. *Journal of Alloys and Compounds*, 932, 167624. (2023)

- [63] Shi, E., Zhang, L., Li, Z., Li, P., Shang, Y., Jia, Y., ... & Cao, A. TiO₂-coated carbon nanotube-silicon solar cells with efficiency of 15%. *Scientific reports*, 2(1), 884. (2012)
- [64] Wang, F., & Matsuda, K. Applications of carbon nanotubes in solar cells. In *Nanocarbons for energy conversion: supramolecular approaches* (pp. 497-536). Springer, Cham. (2019)
- [65] Wang, F., Kozawa, D., Miyauchi, Y., Hiraoka, K., Mouri, S., Ohno, Y., & Matsuda, K. Considerably improved photovoltaic performance of carbon nanotube-based solar cells using metal oxide layers. *Nature communications*, 6(1), 6305. (2015)
- [66] Gorji, N. E., & Houshmand, M. Carbon nanotubes application as buffer layer in Cu (In, Ga) Se₂ based thin film solar cells. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 50,122-125. (2013)
- [67] Movla, H., Chavoshi, S. A., & Bargahi, A. Interface effects in SWCNT/GaAs heterojunction solar cell: A simulation study. *Optik*, 126(9-10), 1057-1060. (2015)

V. Conclusion générale

Les cellules solaires à couches minces se révèlent prometteuses pour relever les défis actuels et futurs de la production d'électricité en raison de leur élaboration à partir de matériaux abondants, peu coûteux et non toxiques. Cette recherche se concentre sur l'amélioration de la structure des cellules photovoltaïques utilisées pour la simulation numérique. La structure de la cellule photovoltaïque étudiée dans cette thèse est composée de Mo/ (SnS, CuInSe₂, MoSe₂) /CIGS/ (Zn (O, S), ZnSe, SnS₂, CdS) /AZO, et elle a été optimisée par logiciel SCAPS-1D. L'utilisation de ces matériaux spécifiques vise à maximiser l'efficacité de conversion de l'énergie solaire en électricité.

Cette thèse se concentre sur l'étude des caractéristiques (J_{sc} , V_{oc} , FF et PCE) des dispositifs solaires utilisant des cellules à base de matériau inorganique CIGS, pour lesquels nous avons optimisé des paramètres tels que l'épaisseur, la densité de dopage et l'énergie de la bande interdite. L'objectif est d'améliorer l'efficacité de conversion d'énergie. Cette approche permet de mieux comprendre les facteurs influençant l'efficacité des cellules solaires CIGS et ouvre la voie à des améliorations significatives dans leur rendement énergétique.

L'objectif initial était de réaliser une étude comparative des différentes couches tampons, également connues sous le nom de couches de transport d'électrons (ETLs), comprenant Zn (O, S), ZnSe, SnS₂ et CdS en optimisant l'épaisseur de la couche absorbante CIGS. Nos résultats indiquent des rendements respectifs de 19.63%, 22.46%, 23.50% et 23.67% pour une épaisseur de 1.5 μm . Notamment, le SnS₂ s'est avéré être un choix prometteur en tant que matériau de transport d'électrons ETM avec une fine épaisseur de 50 nm. Dans le cadre de notre deuxième étude, nous nous sommes penchés sur l'amélioration du rendement de conversion en ajoutant une couche de champs de surface arrière avec différents types de matériaux, également appelés HTLs (SnS, CIS, MoSe₂). Le but de cette étape consiste à améliorer la collecte des porteurs de charge générés lors de l'absorption de la lumière solaire. En créant une barrière énergétique à la surface arrière de la cellule, cette approche vise à réduire la recombinaison des porteurs de charge, augmentant ainsi l'efficacité globale de la cellule solaire. Nos résultats ont révélé des rendements optimaux de 24.12% et 24.62% pour les deux couches HTLs (CIS et MoSe₂), respectivement, à une même épaisseur de la

couche absorbante de 1.5 μm . La couche BSF (SnS), quant à elle, a présenté un rendement optimal de 26.67% mais elle à une épaisseur réduite de seulement 1 μm , émergeant comme un choix judicieux en tant que matériau de transport d'électrons HTM.

Ce travail nous a permis d'obtenir une structure de cellule solaire spécifiquement, Mo/SnS/CIGS/SnS₂/AZO, comme une première optimisation dans cette étape était d'optimiser les paramètres de la couche BSF(SnS) l'épaisseur, dopage et gap. Cette étape a conduit à un rendement de conversion de 29.79% pour une épaisseur mince de 40 nm, et des valeurs de dopage et de bande interdite significatives de $3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ et 3.2 eV respectivement. Dans la deuxième phase d'optimisation, nous avons ciblé le dopage et la bande interdite de la couche CIGS, avec et sans la couche BSF(SnS), tout en maintenant une épaisseur constante de 1 μm pour la couche absorbante. Dans le cas sans BSF, le rendement de conversion d'énergie s'est élevé à 22.57%, avec un dopage important et une bande interdite de $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et 1.24 eV respectivement. En revanche, avec la présence de la couche BSF, le PCE a atteint une efficacité importante de 30.65% avec un faible dopage et un gap de $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et 1.14 eV respectivement. Par la suite, nous avons procédé à l'optimisation de l'épaisseur, du dopage et du gap de la couche tampon SnS₂. Cette étape a conduit à un rendement de meilleur rendement de conversion d'environ 31%, avec une fine épaisseur de 40 nm, un gap et un dopage important de 1.7 eV et de $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ respectivement.

En tant que dernière étape de notre étude, nous avons substitué la couche absorbante inorganique CIGS par une couche organique de SWWCNTs dans le but d'éliminer l'effet nocif total de la cellule étudiée. L'optimisation de la structure Mo/SWCNTs/SnS₂/AZO a conduit à un rendement de 22.65% pour une épaisseur de 4 μm , une concentration de dopage de $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et une énergie de bande de 1.1 eV à une température de 300 K.

Dans le cadre de nos perspectives de recherche, il est essentiel d'étudier l'effet des interfaces de notre cellule et d'explorer l'impact de la résistance en série et en parallèle sur les performances des deux structures, à savoir Mo/SnS/CIGS/SnS₂/AZO et Mo/SWCNTs/SnS₂/AZO.

Une optimisation de la couche tampon AZO pour les deux structures est nécessaire afin d'évaluer son influence sur le rendement. Ce processus permettra d'observer le comportement de conversion de manière approfondie.

Il est également crucial d'intégrer une couche BSF (Back Surface Field) dans la structure basée sur le matériau organique SWCNTs. Cet ajout vise à maximiser le rendement de conversion.

En outre, il serait intéressant de reproduire cette étude en utilisant une structure différente, telle qu'une cellule à base de pérovskite en tandem à multijonctions. Cette approche élargirait notre compréhension des mécanismes de conversion et ouvrirait de nouvelles perspectives dans le domaine de la recherche sur les cellules solaires.