



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

**UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID – TLEMCCEN**

# THÈSE

Présentée à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

**DOCTORAT LMD**

Spécialité: *Energies Renouvelables*

Par :

**Mr. Merwan RACHEDI**

Sur le thème

---

## **ETUDE ET SIMULATION DES PROPRIETES PHOTOVOLTAIQUES DES CELLULES SOLAIRES A BASE DU CHALCOPYRITE CIGS**

---

Soutenue publiquement le:

Mr AMARA Sofiane	Professeur	Université de Tlemcen	Président
Mr MERAD Abdelkrim	Professeur	Université de Tlemcen	Directeur de thèse
Mr OUAHRANI Tarik	Professeur	E.S.S.A. - Tlemcen	Examineur
Mr BABA AHMED Nassim	Maitre de Conférence « A »	Université de Tlemcen	Examineur
Mr BAGHDADLI Tewfik	Maitre de Conférence « A »	Université de Tlemcen	Examineur

Unité de Recherche Matériaux et Energies Renouvelables (URMER)  
BP 119, 13000 Tlemcen - Algérie

## Remerciements

---

*Le travail présenté dans cette thèse a été effectué à l'Unité de Recherche Matériaux et Énergies Renouvelables (URMER), Université Abou BekrBelkaid – Tlemcen.*

*En premier je remercie DIEU tout puissant de m'avoir donné le courage, la force et la patience d'achever ce modeste travail.*

*Je tiens à remercier mon directeur de thèse Monsieur **MERAD Abdelkrim**, Professeur au département de Physique, Faculté des Sciences à l'université Abou bekr Belkaid de Tlemcen qui a toujours été à mon écoute, qui a su me guider vers les bonnes références, pour ses conseils, son aide précieuse et pour les connaissances transmises que ce soit techniques, scientifiques.*

*J'adresse mes sincères remerciements à Mr **AMARA Sofiane** Professeur à l'université Abou bekr Belkaid de Tlemcen pour avoir accepté d'être le président de mon jury.*

*Je tiens également à remercier vivement les membres du jury : Mr **OUAHRANI Tarik** Professeur à école supérieure en sciences appliquées Tlemcen et Mr **BABA AHMED Nassim** Maitre de Conférence à l'université de Tlemcen et Mr **BAGHDADLI Tewfik** Maitre de conférence à l'université de Tlemcen pour avoir accepté d'évaluer ce travail et cette thèse.*

*Enfin, je tiens à remercier toute personne qui a contribué de près ou de loin à la réussite de ce travail.*

## *DEDICACE*

---

*A la mémoire de mon père*

*A ma mère pour son sacrifice, son amour, sa tendresse et ses encouragements*

*A mon épouse Zineb, qui m'a soutenu jusqu'à la fin de ce travail*

*Et mes petits anges Sanaa et Amani*

*A mes frères et toute ma famille.*

*Merwan RACHEDI*

# Sommaire

---

<b>Introduction générale</b>	<b>1</b>
<b>Chapitre : 1 : Généralités sur les matériaux Chalcopyrites</b>	<b>9</b>
<b>1. Introduction :</b>	<b>9</b>
<b>2. Propriétés générales des composés chalcopyrites</b>	<b>10</b>
<b>2.1. Propriétés électriques</b>	<b>10</b>
<b>2.2. Propriétés optiques</b>	<b>12</b>
<b>3. Cellules solaires à base de CIGS</b>	<b>13</b>
<b>3.1. Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque</b>	<b>13</b>
<b>3.2. Propriétés du matériau CIGS</b>	<b>17</b>
<b>3.2.1. Généralités sur les éléments de bases du matériau CIGS</b>	<b>17</b>
<b>3.2.2. Structure cristalline et différents alliages dérivés du <math>\text{CuInSe}_2</math></b>	<b>19</b>
<b>3.2.2. 1. Structure cristalline</b>	<b>19</b>
<b>3.2.2. 2. Différents alliages dérivés du <math>\text{CuInSe}_2</math></b>	<b>20</b>
<b>3.3.3. Orientation cristalline</b>	<b>21</b>
<b>3.3.3. Propriétés électroniques</b>	<b>21</b>
<b>3.3.3.1 Structure de la bande</b>	<b>21</b>
<b>3.3.3.2 Joints de grains</b>	<b>23</b>
<b>3.3.3.3 Dopage</b>	<b>24</b>
<b>4. Conclusion</b>	<b>25</b>

---

# Sommaire

---

<b>Chapitre : 2 : Généralités sur les cellules solaires simple à base de CIGS</b>	<b>30</b>
1. Introduction	30
2. Cellules solaires à base de CIGS	31
2.1. Structure de la cellule solaire en CIGS	31
2.2. Contact arrière	32
2.3. Absorbeur	33
2.4. Couche tampon	33
2.5. Couche fenêtre	34
3. Diagramme de bandes d'une cellule solaire en CIGS	36
3.1. Diagramme de phase du $\text{CuInSe}_2$	37
3.2. Propriétés optiques	39
3.4. Dopage	40
4. Filières photovoltaïques	41
5. Conclusion	41

---

<b>Chapitre : 3 : Simulation des cellules solaires à base de CIGS par le SCAPS</b>	<b>46</b>
I- Introduction	46
II-Présentation du logiciel de simulation scaps	47
III- Structure de la cellule	49
III-1- Cellule solaire à base de CIGS de SCAPS	50
III-2- Paramètres physiques et optiques de la couche cellulaire avec CIGS	51
III-3- Simulation de cellules solaires basée sur le CIGS	52

---

# Sommaire

---

<b>Chapitre : 4 : Résultats et discussion</b>	<b>56</b>
<b>I- Introduction</b>	<b>56</b>
<b>II- Résultats et discussion</b>	<b>56</b>
<b>II-1-Cellule solaire basée sur le CIGS de SCAPS Modifier</b>	<b>56</b>
<b>II-2- Simulation de cellules solaires basée sur le CIGS</b>	<b>57</b>
<b>II-2-1- Effet des différentes épaisseurs de CIGS:</b>	<b>58</b>
• <b>Effet de la couche absorbante CIGS:</b>	<b>58</b>
<b>II-2-1-1- Etude de la variation de l'Efficacité en fonction de l'épaisseur de la couche CIGS</b>	<b>58</b>
<b>II-2-1-2- Etude de la variation du facteur de remplissage en fonction de l'épaisseur de la couche CIGS</b>	<b>59</b>
<b>II-2-1-3- Etude de la variation du courant de court-circuit en fonction de l'épaisseur de la couche CIGS</b>	<b>59</b>
<b>II-2-1-4- Etude de la variation de la tension en circuit ouvert en fonction de l'épaisseur de la couche CIGS</b>	<b>60</b>
<b>II-2-2- Effet des différentes épaisseurs de CdS:</b>	<b>61</b>
• <b>Effet de la couche tampon CdS:</b>	<b>61</b>
<b>II-2-2-1- Etude de la variation de l'Efficacité en fonction de l'épaisseur de la couche CdS</b>	<b>62</b>
<b>II-2-2-2- Etude de la variation du facteur de remplissage en fonction de l'épaisseur de la couche CdS</b>	<b>62</b>
<b>II-2-2-3- Etude de la variation du courant de court-circuit en fonction de l'épaisseur de la couche CdS</b>	<b>63</b>
<b>II-2-2-4- Etude de la variation de la tension en circuit ouvert en fonction de l'épaisseur de la couche CdS</b>	<b>64</b>

# Sommaire

---

<b>II-2-3- Effet ds différentes épaisseurs de ZnO:</b>	<b>64</b>
<b>• Effet de la couche de fenêtre ZnO:</b>	<b>64</b>
<b>II-2-3-1- Etude de la variation de l'Efficacité en fonction de l'épaisseur de la couche de ZnO</b>	<b>65</b>
<b>II-2-3-2- Etude de la variation du facteur de remplissage en fonction de l'épaisseur de la couche de ZnO</b>	<b>65</b>
<b>II-2-3-3- Etude de la variation du courant de court-circuit en fonction de l'épaisseur de la couche de ZnO</b>	<b>66</b>
<b>II-2-3-4- Etude de la variation de la tension en circuit ouvert en fonction de l'épaisseur de la couche de ZnO</b>	<b>67</b>
<b>Conclusion</b>	<b>67</b>
<hr/>	
<b>Conclusion générale</b>	<b>68</b>
<hr/>	

# Sommaire

---

## Listes des figures et des tableaux

### Chapitre : 1 : Généralités sur les matériaux Chalcopyrites

<b>Tableau 1.</b> Valeurs des paramètres électriques obtenues pour des composés Chalcopyrite	12
<b>Tableau 2:</b> Propriétés physiques et chimiques des éléments Cu, In, Ga et Se.	18
<b>Tableau 3 :</b> Classification périodique des éléments constituant la famille I-II-VI <sub>2</sub>	18
<b>Figure 1.</b> Coefficient d'absorption de CuInSe <sub>2</sub> et CuIn <sub>0.7</sub> Ga <sub>0.3</sub> Se <sub>2</sub> en fonction de longueur d'onde	13
<b>Figure 2 :</b> Semi-conducteurs de type p et n et position du niveau de Fermi E <sub>F</sub> .	14
<b>Figure 3 :</b> Schéma de principe et diagramme de bande d'une jonction p-n à l'équilibre	15
<b>Figure 4 :</b> Caractéristique I-V d'une jonction p-n à l'obscurité	16
<b>Figure 5 :</b> Principe d'un dispositif photovoltaïque : 1 : courant d'obscurité, 2 : photocourant	16
<b>Figure 6:</b> (a) Structure de la maille élémentaire du zinc-blende, (b) Structure de la maille élémentaire de la chalcopyrite du CuInSe <sub>2</sub>	19
<b>Figure 7:</b> Evolution des valeurs de paramètres de maille a et c, et du rapport c/a en fonction du rapport Ga/(Ga+In) pour Cu(In <sub>1-x</sub> Ga <sub>x</sub> )Se <sub>2</sub>	20
<b>Figure 8:</b> Bande interdite E <sub>g</sub> en fonction de la constante de réseau a des éléments CuInSe <sub>2</sub> , CuGaSe <sub>2</sub> , CuInS <sub>2</sub> et CuGaS <sub>2</sub>	21

# Sommaire

---

**Figure 9:** Principaux types de gradients de bande interdite rencontrés dans les couches de CIGS : a) bandes plates, b) simple gradient, c) double gradient d'après **23**

**Figure 10:** structures électroniques possibles aux joints de grains, entre un grain  $g_1$  et un grain  $g_2$  : a) présence de défauts chargés entraînant une courbure de bandes et des ecombinaisons. b) passivation des défauts par l'oxygène ou le sodium. **24**

**Figure 11:** Valeurs théoriques des énergies de transition électronique des principaux défauts cristallins dans le CIS **25**

---

## Chapitre : 2 : Généralités sur les cellules solaires simple à base de CIGS

**Figure 1 :** Structure en coupe d'une cellule CIGS : (a) schéma, (b) Image au microscope à Balayage (MEB) **31**

**Figure 2:** Structure de bande d'une cellule solaire  $Cu(In, Ga)Se_2$  **35**

**Figure 3:** Diagramme de bandes d'une cellule CIGS/CdS/ZnO **36**

**Figure 4 :** Diagramme de phase pseudo-binaire de  $Cu_2Se-In_2Se_3$  **38**

**Figure 5 :** Coefficient d'absorption des matériaux  $CuInSe_2$ , CdTe, GaAs, a-Si : H, mono-Si et CdS **39**

**Figure 6:** Indice de réfraction complexe de  $CuInSe_2$  et  $CuIn_{1-x}Ga_xSe_2$  **40**

**Figure 7:** Évolution en laboratoire du rendement des cellules photovoltaïques **41**

---

## Chapitre : 3 : Simulation des cellules solaires à base de CIGS par le SCAPS

**Figure1:** Fenêtre du logiciel SCAPS pour écrire les paramètres d'une cellule **48**

**Tableau 1.** Cellules PV avec structures matérielles vs. Solaires **50**

**Figure 2:** Schéma d'une cellule solaire CIGS à couche mince **50**

# Sommaire

---

**Tableau 2:** paramètre pour cellule solaire utilisant la simulation Scaps **51**

**Figure 3:** Cellule solaire basée sur le CIGS **52**

---

## Chapitre : 4 : Résultats et discussion

**Tableau 1:** Paramètres des cellules solaires déduits de la courbe IV calculée **57**

**Figure 1:** Cellule solaire basée sur le CIGS Modifier **57**

**Figure 2:** Variation de l'efficacité en fonction de l'épaisseur de la couche CIG **58**

**Figure 3:** Variation du facteur de remplissage en fonction de l'épaisseur de la couche CIGS **59**

**Figure 4:** Variation du courant de court-circuit en fonction de l'épaisseur de la couche CIGS **60**

**Figure 5:** Variation de la tension en circuit ouvert en fonction de l'épaisseur de la couche CIGS **60**

**Figure 6:** Variation de l'efficacité en fonction de l'épaisseur de la couche de CdS **62**

**Figure 7:** Variation du facteur de remplissage en fonction de l'épaisseur de la couche CdS **63**

**Figure 8:** Variation du courant de court-circuit en fonction de l'épaisseur de la couche CdS **63**

**Figure 9:** Variation du courant de court-circuit en fonction de l'épaisseur de la couche CdS **64**

**Figure 10:** Variation de l'efficacité en fonction de l'épaisseur de la couche de ZnO **65**

# Sommaire

---

**Figure 11:** Variation du facteur de remplissage en fonction de l'épaisseur de la couche de ZnO **66**

**Figure 12:** Variation du courant de court-circuit en fonction de l'épaisseur de la couche de ZnO **66**

**Figure 13:** Variation de la tension en circuit ouvert en fonction de l'épaisseur de la couche de ZnO **67**

# Introduction générale

---

## Introduction générale

---

Au rythme de consommation actuelle, l'épuisement des énergies fossiles n'est qu'une question de temps. Cela rend la nécessité de développer les sources d'énergies renouvelables, afin de substituer les énergies conventionnelles, impérative.

Les énergies renouvelables sont des modes de production d'énergie utilisant des forces ou des ressources dont les stocks sont illimités comme : l'eau des rivières, le vent, les végétaux et le soleil.

Il existe plusieurs types tels que l'énergie éolienne, l'énergie hydraulique, la biomasse, la géothermie l'énergie du bois et l'énergie solaire. Cette dernière, est entrain de devenir l'une des principales sources d'énergie en raison de son abondance.

La conversion directe de l'énergie lumineuse issue du soleil en énergie électrique est faite au moyen de cellules photovoltaïques (également appelées cellules solaires)[1].

Depuis le début du siècle, la consommation énergétique mondiale est en très forte croissance dans toutes les régions du monde. Il semble que tendanciellement, les consommations d'énergie vont continuer à augmenter, sous l'effet de la croissance économique d'une part, et de l'augmentation de la consommation d'électricité par habitant d'autre part, quels que soient les cas de figures envisagés.

On parle périodiquement de diverses solutions techniques permettant de "continuer à vivre comme maintenant" sans que cela n'aggrave nos émissions de gaz à effet de serre, en attendant tranquillement que l'efficacité énergétique permette de diminuer les émissions.

## Introduction générale

---

Mais il est important de savoir que l'on ne peut pas filtrer l'atmosphère pour en retirer le gaz déjà émis. La technique ne peut donc rien sur ce plan, et ne nous évitera pas un réchauffement programmé et inévitable d'au moins 1°C en un siècle.

Souvent, la révolution des énergies renouvelables est avancée comme un dénouement à tous nos problèmes de production d'énergie électrique. Mais il serait plus raisonnable de voir ces nouvelles solutions techniques comme un simple frein au réchauffement climatique à condition que notre consommation énergétique ne continue pas d'augmenter exponentiellement.

Cela éviterait ainsi de reproduire les mêmes erreurs du passé en pensant à des solutions "miracles" qui seraient inépuisables et sans impact sur notre mode vie ou sur l'environnement [2].

Les énergies renouvelables (ENR) sont un atout incontournable pour résoudre les problèmes écologiques et satisfaire les besoins énergétiques en constante augmentation. Parmi les différentes sources d'énergies renouvelables en progrès, l'énergie solaire photovoltaïque, considérée propre et inépuisable, est l'une des plus prometteuses comme l'énergie d'avenir pour remplacer les autres sources d'énergie fossiles et nucléaires.

La production de panneaux solaires efficaces, fiables et rentables qui peuvent être largement utilisés pour remplacer les sources d'énergie fossiles est le principal challenge qui peut encourager l'utilisation de tels dispositifs dans la production de l'électricité solaire à l'échelle industrielle.

## Introduction générale

---

L'électricité photovoltaïque (PV) est obtenue par la conversion directe de l'énergie du rayonnement solaire en électricité au moyen de cellules solaires conventionnelles fonctionnant à base de l'effet photovoltaïque. Malgré son coût trop élevé comparativement aux autres sources d'énergie non renouvelables, l'électricité solaire s'avère très compétitive et une solution idéale dans les sites isolés (non connectés au réseau).

L'effet photovoltaïque est la production et le transport de charges négatives (électrons) et positives (trous) sous l'effet de la lumière dans un matériau semi-conducteur. En effet, Les performances du dispositif dépendent de la morphologie du film mince semiconducteur placé entre les deux électrodes. Parmi les films minces utilisés dans les dispositifs photovoltaïques, on peut citer les matériaux chalcopyrites, le silicium et toutes ses formes et CdTe .

L'utilisation des cellules solaires dans le domaine spatiale commençait dans les années quarante. La performance et la taille de ces cellules ont été améliorés grâce à plusieurs recherches, mais pour que l'investissement dans la technologie photovoltaïque et ses applications terrestres soit pris en compte par les industries et les gouvernements, il a fallu attendre la crise énergétique des années soixante-dix notamment la crise du pétrole en automne 1973, un intérêt s'est porté vers l'énergie solaire et l'émergence de nouveaux matériaux photovoltaïques [3].

L'un de ces nouveaux matériaux sont les semi-conducteurs de type chalcopyrite. Ces derniers sont aujourd'hui largement utilisés comme couche absorbante dans les cellules solaires à couches minces, comme cristaux non Centro-symétriques pour l'optique non linéaire et dans la conversion de fréquence optique, application sur les systèmes laser. Cet intérêt est dû au fait que de tels cristaux ont d'excellentes propriétés optiques.

## Introduction générale

---

Ainsi, une connaissance plus précise des propriétés optoélectroniques de ce matériau reste essentielle pour la conception et la fabrication de nouveaux dispositifs électroniques et électro-optiques. En outre, une analyse précise de ces propriétés peut jouer un rôle important dans la détermination de certaines propriétés de leurs alliages par élaboration de leur gap.

Les semi-conducteurs chalcopyrites  $\text{Cu}(\text{Ga}, \text{In})(\text{S}, \text{Se})_2$  sont l'un des candidats prometteurs pour cette tâche. Les matériaux de cette famille se cristallisent dans la 2d. Le diséléniure de cuivre et de gallium  $\text{CuGaSe}_2$  structure tétragonale avec le groupe d'espace I par exemple, a attiré l'attention de nombreux théoriciens et physiciens expérimentateurs grâce à ses applications en optique non linéaire, diodes électroluminescentes et comme matériau absorbeur prometteur pour la production de cellules solaires à haut rendement [4].

Les cellules solaires en couches minces ont des applications photovoltaïques terrestres à grande échelle vu leur faible prix de fabrication. Un certain nombre de semi-conducteur comprenant le CdTe polycristallin, le CIGS et le silicium amorphe (a-Si) ont été élaborés pour les cellules solaires en couches minces. Les cellules solaires à base du CIGS présentent une excellente stabilité et une grande résistance aux rayonnements.

Ils ont un intérêt considérable pour des applications spatiales, des tests d'irradiation de protons et d'électrons sur des cellules solaires en CIGS et CdTe ont montré que leur stabilité contre l'irradiation de particules est supérieure à celles de cellules solaires en Si ou en semiconducteur III-V.

## Introduction générale

---

Le CIGS est un semiconducteur ayant un gap d'énergie approprié et un coefficient d'absorption optique élevé dans le domaine visible du spectre solaire. Le coefficient d'absorption de films en CIGS est 100 fois plus grand que celui du Si dans le domaine visible du spectre solaire. Le rendement maximal de la meilleure cellule solaire en CIGS fabriquée sur des substrats en acier inoxydable est de 17.5 % sous l'illumination AM1.5G [5].

La structure du dispositif est composée par :  $MgF_2/ITO/ZnO/CdS/CIGS/Mo$ /substrat en acier inoxydable. La cellule solaire en CIGS de fraction molaire  $x=0.3$  correspond à une énergie du gap de 1.1-1.2 eV et fabriquée sur des substrats en verre a un rendement de 20 % sous AM1.5G, comme rapporté par l'équipe de recherche de NREL (National Renewable Energy Laboratory).

Dans ces dernières années, des progrès ont abouti à de meilleures cellules dont la couche en CIGS d'épaisseur entre 2.5 et 3  $\mu m$ , et un gap d'énergie dans la gamme entre 1.2 et 1.3 eV dépassant le rendement 20 % et ayant atteint un nouveau record mondial de 20.3 %. Une étude par simulation numérique à l'aide de l'outil de la simulation AMPS-1D d'une cellule solaire en CdS/CIGS a abouti à un rendement maximal de 19 % [6].

Dans le premier chapitre nous présentons un état de l'art sur les matériaux Chalcopyrites, ainsi que Propriétés générales des composés chalcopyrites et les cellules solaires à base de CIGS.

Le deuxième chapitre est consacré au domaine des généralités sur les cellules solaires simple à base de CIGS. Nous présentons en premier les cellules solaires à base de CIGS ; structure de la cellule solaire en CIGS, aussi que tous les propriétés des cellules, tout en présentent les conversions photovoltaïque actuelles.

## Introduction générale

---

Les deux derniers chapitres sont consacrés aux cellules solaires à base de CIGS. Dans le troisième chapitre nous présentons l'architecture d'une cellule solaires à base de CIGS, ses paramètres et ses caractéristiques, sans oublier les modes de fonctionnement de ce dernier que les différentes équations. Nous sommes intéressés à simulation des cellules solaires à base de CIGS par le SCAPS. Le quatrième chapitre est consacré à l'interprétation des résultats de la simulation pour les différents couches étudiées : absorbeur, couche tampon et couche fenêtre.

On termine notre travail par une conclusion générale et des perspectives.

## Introduction générale

---

### References:

[1] G. Masson, M. Latour, M. Rekinge, I. T. Theologitis and M. Papoutsis, « Global Market Outlook for photovoltaics », Technical report, EPIA, 2013.

[2] M. A. Green, K. Emery, Y. Hishikawa and W. Warta, « Solar cell efficiency tables (version 41) », Prog.Photovolt., Vol.21, 2013.

[3] S. Saji, Ik-Ho Choi and Chi-Woo Lee, « Progress in electrodeposited absorber layer for CuIn<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>Se<sub>2</sub> (CIGS) solar cells », Associate Editor TakhirRazykov, 2011.

[4] Chenlei Wang, Hui Zhang, Tihu Wang, LiliZheng, « Solidification interface shape control in a continuous Czochralski silicon growth system », Journal of Crystal Growth, Volume 287, Issue 2, 25 January 2006, Pages 252-257.

[5] Theresa L. Jester, « Crystalline Silicon Manufacturing Progress », Progress In Photovoltaics: Research AND Applications ,Prog. Photovolt: Res. Appl. 2002; 10:99-106 (DOI: 10.1002/pip.414).

[6] Kray, D.; Schumann, M.; Eyer, A.; Willeke, G.P.; Kubler, R.; Beinert, J.; Kleer, G.; “Solar Wafer Slicing with Loose and Fixed Grains”; Photovoltaic Energy Conversion Page(s) : 948–951, Digital Object Identifier 10.1109/WCPEC.2006.279613.

### 1. Introduction :

Les alliages ternaires des composés semi-conducteurs III-V, sont considérés comme une classe importante des matériaux et cela grâce à l'ajustement de leur paramètre du réseau, gap énergétique, indice de réfraction, constantes optiques et d'autres paramètres physiques qui peuvent être ajustés et contrôlés pour l'obtention d'un composant optoélectronique bien désiré.

Les recherches actuelles menées sur les composés  $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$  révèlent que le matériau  $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$  (CIGS) est le plus émergent.

En couches minces polycristallines, il est pratiquement incontournable en raison des rendements élevés atteints en laboratoire et de la stabilité remarquable qu'il assure dans le temps. Les matériaux  $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$  appartiennent à la filière de matériaux chalcopyrites.

Cette nomination "chalcopyrite" a été attribuée pour la première fois en 1725 par les chercheurs d'Or au  $\text{CuFeS}_2$ . Le premier matériau étudié de cette filière est le  $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$ . Il a été synthétisé pour la première fois en 1953 par Hahn [1].

Ce n'est qu'en 1974 qu'il a été proposé pour des applications photovoltaïques [2]. C'est dans ces mêmes années 70, qu'un premier examen complet sur ces composés a été donné par Shay et Wernick [28]. Plus tard, Pamplin a édité plusieurs revues au sujet de la thermodynamique des changements de phase [3].

Ces travaux étaient presque entièrement consacrés aux monocristaux. Il a été élaboré sous forme de couches minces poly-cristallines comme couche active en 1983. Les premiers rendements obtenus étaient de l'ordre de 10%, enregistrés par la société Boeing Corp, en utilisant le procédé de la co-évaporation à trois creusets. En 1987, la société Arco Solar a donné un rendement de 10.1%.

Ce n'est qu'à partir de 1990 que la substitution du Gallium par l'Indium a été réalisée, pour former les composés quaternaires  $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$  (CIGS) dans le but d'améliorer les rendements de conversion photovoltaïque déjà obtenus.

Il a fallu presque dix ans pour que ce résultat soit concrétisé dans la production industrielle des modules solaires. L'année 1998 marque la date du premier module solaire industrialisé à base de  $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ [37].

## 2. Propriétés générales des composés chalcopyrites

### 2.1. Propriétés électriques

Les propriétés électriques sont des caractéristiques importantes pour les matériaux utilisés comme absorbeurs afin d'obtenir des rendements élevés. Les études effectuées sur les caractérisations électriques des couches minces chalcopyrites ont montré qu'elles dépendent fortement de la composition et sont gouvernées par la présence des défauts dans la structure.

Ces derniers contrôlent principalement la conductivité électrique de ces matériaux, c'est pourquoi la mise en évidence et la caractérisation de ces défauts sont utiles pour déterminer leurs propriétés.

Dans les composés chalcopyrites les déviations de la composition stœchiométrique permettent l'augmentation des différents défauts intrinsèques et génèrent des donneurs ou des accepteurs dépendant, soit d'un anion soit d'un cation, qui est en excès.

Les défauts de concentration très élevée sont distribués d'une manière aléatoire dans les couches, les lacunes de l'atome non métallique agissent positivement comme donneurs conduisant au type n, ceux de I et III agissent négativement comme accepteurs. Le type de conduction peut aussi être corrélé à d'autres défauts intrinsèques tels que le désordre entre des cations interstitiels ou des anti-sites conduisant à des états électriquement actifs [4].

## Chapitre : 1 : Généralités sur les matériaux Chalcopyrites

---

Newman a conclu, à partir d'une étude sur l'influence de la composition sur les propriétés électriques du CuInSe<sub>2</sub> élaboré par la technique Bridgman, que ces propriétés sont cohérentes avec le modèle des défauts ponctuels intrinsèques. D'autres auteurs présentent également des résultats sur des couches minces de CISe préparées par des méthodes différentes.

Ils ont étudié le type de conductivité en fonction des concentrations des constituants et ont constaté que les deux type de conduction n et p peuvent être obtenus avec différentes valeurs de résistivité par un choix approprié de la composition. Cette variation de la résistivité avec le rapport, qui est un paramètre clé contrôlant les propriétés électriques, a été toujours observée dans ce matériau [5].

Une conversion de la conductivité a lieu dans les couches minces de CuInSe<sub>2</sub> du type p vers le type n et vice-versa en contrôlant la concentration de Se par un recuit sous une atmosphère de Se à haute pression.

Cette propriété présente une différence fondamentale entre le CuInSe<sub>2</sub> et les autres dérivées chalcopyrites qui ont la difficulté d'être de type n, C'est pourquoi de nombreuses études ont été focalisées sur le dopage de ces matériaux pendant leurs croissances [6,7].

Les défauts sont utilisés pour doper le cristal semi conducteur; le changement de leurs populations entraîne une localisation des états et la formation d'une bande d'énergie d'impuretés située près des bandes intrinsèques et qui seront responsables de la conduction.

Les principaux résultats rapportés sur les paramètres électriques (type de conduction, mobilité...) des couches minces de quelques composés chalcopyrites préparées par différentes méthodes sont regroupés dans le tableau 1.

## Chapitre : 1 : Généralités sur les matériaux Chalcopyrites

**Tableau 1.** Les valeurs des paramètres électriques obtenues pour des composés chalcopyrites.

Composé	Conductivité ( $\Omega$ cm)-1	type	Mobilité ( $\text{cm}^2\text{v}^{-1}\text{s}^{-1}$ )	Concentration ( $\text{cm}^{-3}$ )	réf
CuInSe <sub>2</sub>	0,02-0,3	P	10-100	-	[28]
	0,1-5	n	300-800	$5,10^{15}$ - $10^{17}$	[29]
	$2,15 \cdot 10^{-3}$ - $1,6 \cdot 10^{-1}$	n	1,74-5,88	$2,28 \cdot 10^{15}$ - $5,74 \cdot 10^{17}$	[30]
	0.05	p	1,99	$1,6 \cdot 10^{17}$	[30]
CuGaTe <sub>2</sub>	23,25	P	5,1-16.7	$10^{19}$	[31]
	12.56	p	3,7	$2,2 \cdot 10^{19}$	[31]
CuInTe <sub>2</sub>	195	p	52	$2,3 \cdot 10^{19}$	[32]

### 2.2. Propriétés optiques

Les semi-conducteurs susceptibles d'être utilisés comme absorbeurs dans les cellules solaires doivent avoir des meilleures qualités optiques pour des rendements de conversion convenables. Il faut de préférence utiliser des semi-conducteurs ayant une bande électronique interdite directe et de valeur adaptée au spectre solaire de l'ordre de 1,5 eV.

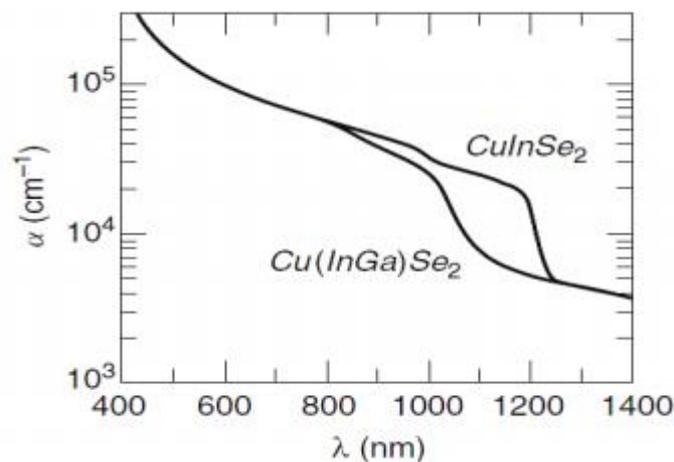
Ces propriétés optiques sont généralement dominées par les conditions de dépôt. Les matériaux chalcopyrites ont d'excellentes propriétés optiques. Il a été montré dans de nombreuses études optiques que les composés Cu-III-IV<sub>2</sub> se distinguent par des coefficients d'absorption élevés de l'ordre de  $10^4$   $\text{cm}^{-1}$  [8] dans l'infrarouge et le visible et des largeurs des bandes interdites comprises entre 0,96 eV – 1,7 eV [9,10 ].

Diverses valeurs de la bande interdite obtenues selon les conditions de préparation sont variant largement dans le domaine de 0,88 - 1,04 eV pour CuInSe<sub>2</sub> et de 0,92 - 1,06 eV pour le CuInTe<sub>2</sub>.

Cet intervalle d'énergie est attribué à la présence des phases secondaires et des états localisés dans la bande interdite qui seront évidemment ignorés grâce à une recristallisation des grains lors d'un traitement de recuit.

Si le CIGS est utilisable dans des dispositifs photovoltaïques en couches minces, c'est parce qu'il possède un gap direct. De ce fait, l'absorption des photons ayant une énergie proche du gap ne nécessite pas l'intervention de phonons et il en résulte un coefficient d'absorption optique élevé (comparé à un semiconducteur à gap indirect comme le silicium).

Les propriétés optiques des couches absorbeurs  $\text{CuInSe}_2$  ont été largement étudiées par plusieurs groupes de recherche [20]. Le coefficient d'absorption de  $\text{CuInGaSe}_2$ ,  $\text{CuInSe}_2$  est très élevé et supérieur à dans le domaine du visible et le proche infrarouge (Figure 1).



**Figure 1.** Coefficient d'absorption de  $\text{CuInSe}_2$  et  $\text{CuIn}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{Se}_2$  en fonction de longueur d'onde [11,12].

### 3. Cellules solaires à base de CIGS

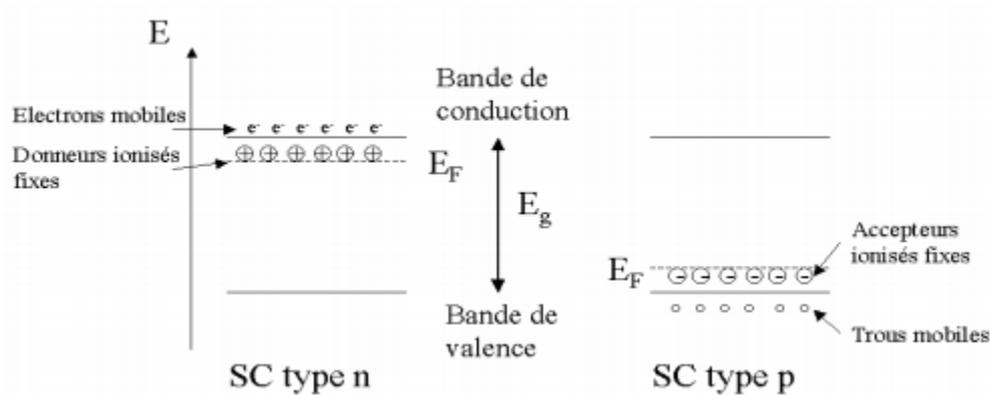
#### 3.1. Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque

La conversion de la lumière en électricité, appelée effet photovoltaïque, a été découverte par E. Becquerel en 1839 [13], mais il faudra attendre près d'un siècle pour que ce phénomène physique soit utilisé. Les premiers panneaux photovoltaïques ont été réalisés dans les années 1950 pour équiper les satellites. Les cellules solaires inorganiques sont basées sur la technologie des semiconducteurs et la jonction p-n. Un semi-conducteur (SC) est un matériau présentant une bande interdite ( $E_g$ ) de quelques eV entre la bande de valence et la bande de conduction, avec le niveau de Fermi dans la bande interdite.

## Chapitre : 1 : Généralités sur les matériaux Chalcopyrites

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

Il est de type p lorsque ce sont les trous, dans ce cas le niveau de Fermi est proche de la bande de valence. La figure 2 présente la position du niveau de Fermi  $E_F$  pour les deux types de semi-conducteurs.



**Figure 2 :** Semi-conducteurs de type p et n et position du niveau de Fermi  $E_F$ . [14]

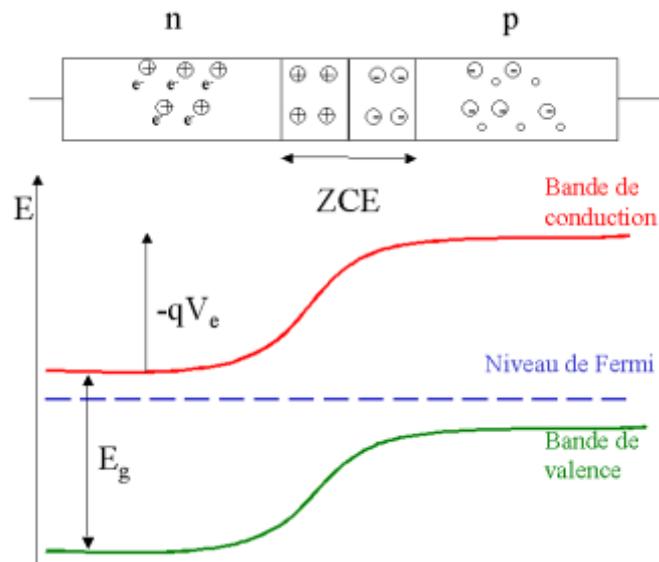
Les charges associées aux donneurs (type n) et aux accepteurs (type p) L'assemblage de deux semi-conducteurs de types différents forme la jonction p-n. Il existe deux types de jonctions : lorsque les deux semi-conducteurs sont issus de deux matériaux différents, on parle d'hétérojonction, lorsque la jonction p-n est formée d'un seul matériau comportant des zones avec des dopages différents p et n, on parle alors d'homojonction (ex : homojonction Si) [15].

Lors du contact entre zones p et n, les porteurs majoritaires de chacune diffusent à travers la surface de contact, il se crée une zone chargée positivement du côté du semiconducteur n et une zone chargée négativement du côté du semi-conducteur de type p.

## Chapitre : 1 : Généralités sur les matériaux Chalcopyrites

Cette zone de transition est appelée zone de charge d'espace (ZCE). Le gradient de concentration des porteurs majoritaires induit la présence d'un champ électrique permanent dans cette ZCE à l'équilibre.

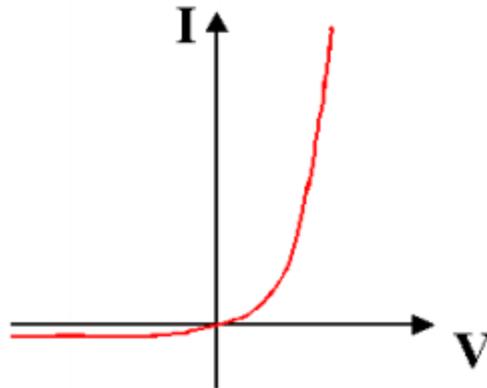
Les niveaux de Fermi des deux zones s'égalisent, ce qui provoque une courbure du diagramme de bande, introduisant une barrière de potentiel  $V_e$  à l'interface. Le principe de la jonction p-n est présenté en figure 2.



**Figure 3 :** Schéma de principe et diagramme de bande d'une jonction p-n à l'équilibre [16].

Lorsque la jonction est en polarisation directe, la barrière de potentiel diminue jusqu'à une valeur à laquelle les électrons dans la bande de conduction peuvent transiter du semiconducteur de type n vers le semi-conducteur de type p.

Lorsque la jonction est polarisée en inverse, la barrière de potentiel augmente et inhibe le passage des électrons. La caractéristique courant-tension (I-V) d'une jonction p-n à l'obscurité est donc celle d'une diode (Figure 4).

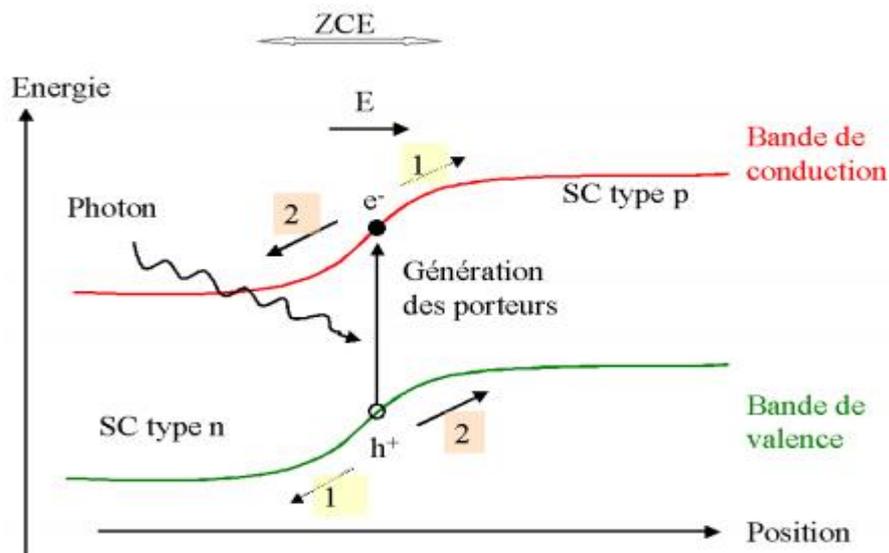


**Figure 4 :** Caractéristique I-V d'une jonction p-n à l'obscurité [17]

Sous illumination, un semi-conducteur absorbe les photons incidents lorsque leur énergie est plus grande que celle de la bande interdite ( $E_g$ ). Il y a formation de paires électrons-trous. Sans jonction p-n, ces électrons-trous se recombinent.

La présence du champ électrique  $E$  dans la ZCE permet aux charges de se séparer : l'excès d'électrons diffuse vers le côté n, et l'excès de trous diffuse vers le côté p.

Un photocourant de porteurs minoritaires apparaît donc, opposé au courant de porteurs majoritaires déjà présent à l'obscurité (figure 5).



**Figure 5 :** Principe d'un dispositif photovoltaïque : 1 : courant d'obscurité, 2 : photocourant [19].

La ZCE est assez fine, de 100 à 300 nm. Cependant, comme l'électron peut se déplacer sur une longueur de diffusion  $L_n$  pendant sa durée de vie, les électrons collectés correspondent à ceux qui ont pu diffuser jusqu'à la ZCE. Ainsi les absorbeurs des cellules solaires ont souvent une épaisseur proche ou inférieure à la longueur de diffusion de leurs porteurs [18].

### 3.2. Propriétés du matériau CIGS

Le rendement d'une cellule solaire à base de CIGS est fortement dépendant des propriétés du matériau absorbeur. Comme dans le cas d'autres semi-conducteurs, la structure cristalline du CIGS ainsi que sa composition peuvent fortement influencer sur ses propriétés optiques et électroniques.

La bonne compréhension des propriétés physiques de ce matériau est donc nécessaire dans le but d'avoir de très bonnes performances d'un dispositif électronique à base de CIGS.

#### 3.2.1. Généralités sur les éléments de bases du matériau CIGS

La première cellule solaire à base de semiconducteur a été réalisée en 1876 par l'élaboration mécaniquement une couche de sélénium entre deux électrodes. Mais la réalisation des cellules solaires en couches minces à base des matériaux à structures chalcopyrites suite à l'élaboration de cellules photovoltaïques en  $\text{CuInSe}_2/\text{CdS}$  par S.

Wagner en 1974, et ces travaux ont abouti à des rendements de 12% à partir d'un monocristallin de  $\text{CuInSe}_2$ . Des paramètres physiques et chimiques des éléments (Cu, In, Ga, Se) utilisés pour l'élaboration des couches  $\text{CuInSe}_2$  et  $\text{Cu(In,Ga)Se}_2$  sont groupés dans le tableau (2) .

## Chapitre : 1 : Généralités sur les matériaux Chalcopyrites

Paramètres	Cu	In	Ga	Se
Masse atomique (g/mol)	63.546	114.82	69.74	78.96
Configuration électronique	[Kr] 3d <sup>10</sup> 4s <sup>1</sup>	[Kr] 3d <sup>10</sup> 5s <sup>2</sup> 5p <sup>1</sup>	[Ar] 3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>1</sup>	[Ar] 3d <sup>10</sup> 4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup>
Masse volumique à 300 k (g/cm <sup>3</sup> )	8.96	7.31	5.1	4.79
Température de fusion (°C)	1083	156	29.78	217
Température d'ébullition (°C)	2595	2000	2403	688
Conductivité électronique (10 <sup>6</sup> /cm.Ω)	0.596	0.116	0.0678	10 <sup>-12</sup>
Conductivité thermiques (W/cm. K)	4.01	0.816	0.0678	0.0204
Potentiel d'ionisation (1 <sup>er</sup> ) (eV)	7.726	7.786	5.999	9.752
Electronégativité de Pauling	1.9	2	1.81	2.4
Rayon atomique (nm)	0.128	0.162	0.161	0.14

**Tableau 2:** Propriétés physiques et chimiques des éléments Cu, In, Ga et Se [18].

Les deux semi-conducteurs chalcopyrites (CGS et CIGS) appartiennent à la première famille qui est composée d'un élément de la 1ère colonne, d'un élément de la 3ème colonne et d'un élément de la 6ème colonne du tableau périodique des éléments chimiques c'est -à-dire I-III-VI2.

I	III	VI
	<sup>5</sup> <sub>10.81</sub> B	<sup>8</sup> <sub>15.99</sub> O
	<sup>13</sup> <sub>26.98</sub> Al	<sup>16</sup> <sub>32.065</sub> S
<sup>29</sup> <sub>63.546</sub> Cu	<sup>31</sup> <sub>69.74</sub> Ga	<sup>34</sup> <sub>78.96</sub> Se
	<sup>49</sup> <sub>114.82</sub> In	<sup>52</sup> <sub>127.60</sub> Te

**Tableau 3 :** La classification périodique des éléments constituant la famille I-III-VI2 [18].

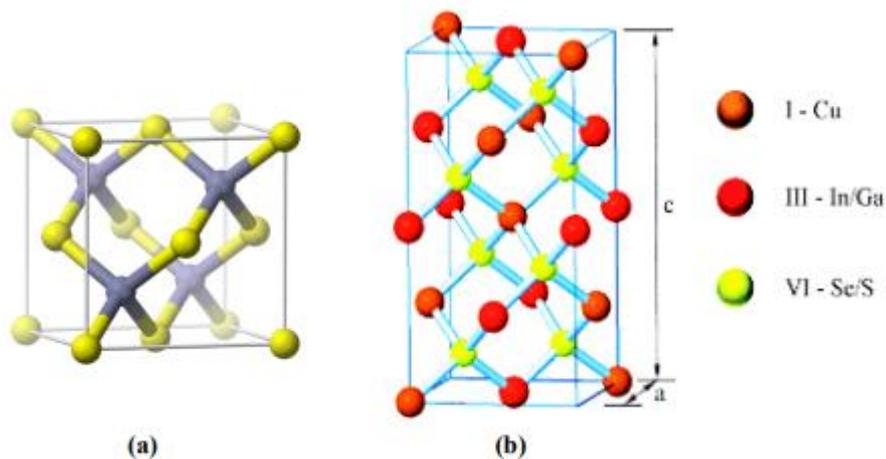
### 3.2.2. Structure cristalline et différents alliages dérivés du $\text{CuInSe}_2$

#### 3.2.2. 1. Structure cristalline

Le  $\text{CuInSe}_2$  et le  $\text{CuGaSe}_2$  sont des matériaux qui forment l'alliage de  $\text{Cu}(\text{In, Ga})\text{Se}_2$ , appartiennent à la famille I-III-VI<sub>2</sub> qui possède une structure tétragonale de chalcopyrite. Les chalcopyrites basés sur le  $\text{CuInSe}_2$  ont une structure cubique zinc blende, également appelée sphalérite comme le  $\text{ZnSe}$ .

Chaque atome de Se est lié tétraédriquement à deux atomes de Cu et d'In, tandis que chaque atome de Cu ou d'In est entouré par quatre atomes de Se. La longueur de la liaison Cu-Se est de  $2,43 \text{ \AA}$  et celle de In-Se est de  $2,57 \text{ \AA}$ , ce qui donne une distorsion tétragonale de l'unité de [19].

Dans le cas du CIGS, les sites des atomes du groupe III sont donc occupés par des atomes d'In ou de Ga, dans des proportions dépendant de la composition de l'alliage.

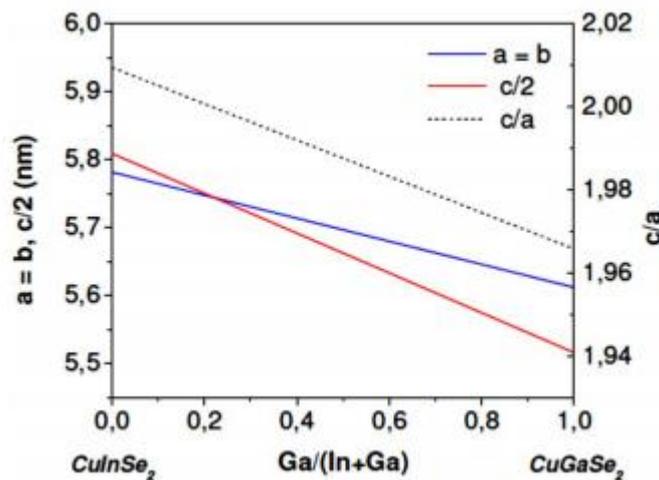


**Figure 6:** (a) Structure de la maille élémentaire du zinc-blende, (b) Structure de la maille élémentaire de la chalcopyrite du  $\text{CuInSe}_2$  [20]

### 3.2.2. 2. Les différents alliages dérivés du CuInSe<sub>2</sub>

Les différents alliages dérivés du CuInSe<sub>2</sub> sont groupés sous le terme Cu (In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>) Se<sub>2</sub> ou  $x = \text{Ga} / (\text{In} + \text{Ga})$  est la composition en Ga représentant le taux d'atomes de gallium qui remplacent les atomes d'indium dans la structure.

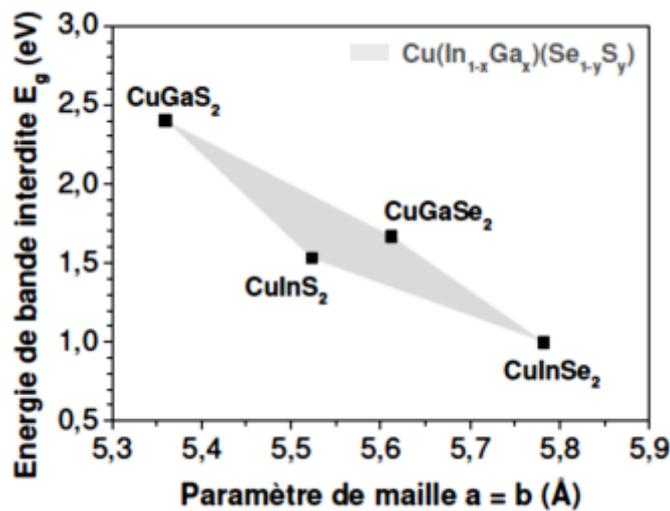
Les différentes solutions solides quaternaires de type Cu (In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>) Se<sub>2</sub> ont été caractérisées par de nombreux auteurs. L'évolution des paramètres de mailles suit la loi de Vegard, c'est-à-dire que les paramètres évoluent linéairement entre les valeurs des deux ternaires associés. L'évolution des paramètres de maille du quaternaire Cu (In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>) Se<sub>2</sub> est représentée sur la figure (7).



**Figure 7:** Evolution des valeurs de paramètres de maille a et c, et du rapport c/a en fonction du rapport Ga/(Ga+In) pour Cu(In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>)Se<sub>2</sub> [21].

Le diagramme présenté sur la figure (8), représente l'évolution de la largeur de la bande interdite en fonction du paramètre de maille a pour les éléments CuInSe<sub>2</sub>, CuGaSe<sub>2</sub>, CuInS<sub>2</sub>, CuGaS<sub>2</sub>.

Ce diagramme montre que la largeur de la bande interdite par exemple de 1,04 eV jusqu'à 2,4 eV pour les deux composés CuInSe<sub>2</sub> et CuGaS<sub>2</sub> respectivement, et même 1,67 eV pour le CuGaSe<sub>2</sub>, ainsi, couvrant la plupart du spectre visible.



**Figure 8:** Bande interdite  $E_g$  en fonction de la constante de réseau  $a$  des éléments CuInSe<sub>2</sub>, CuGaSe<sub>2</sub>, CuInS<sub>2</sub> et CuGaS<sub>2</sub> [22].

### 3.3.3. Orientation cristalline

L'orientation cristalline du CIGS dépend fortement des conditions dans lesquelles il est élaboré, mais aussi des propriétés du substrat. La plupart des études montrent que l'orientation (220/204) permet d'obtenir de meilleures performances photovoltaïques. Il n'existe actuellement pas d'explication claire de cet effet. Il a été montré qu'une orientation préférentielle en (220/204) permet aux atomes de Cd de mieux diffuser dans le CIGS lors du dépôt de la couche de CdS. Cela peut avoir pour effet de générer une couche d'inversion dans le CIGS (jonction enterrée), améliorant la qualité de la diode [23]. Cependant, cette hypothèse est aussi contestée [14]. D'autres études avancent plus généralement que l'orientation (220/204) permet de former une interface CdS/CIGS avec moins de défauts [24] [25].

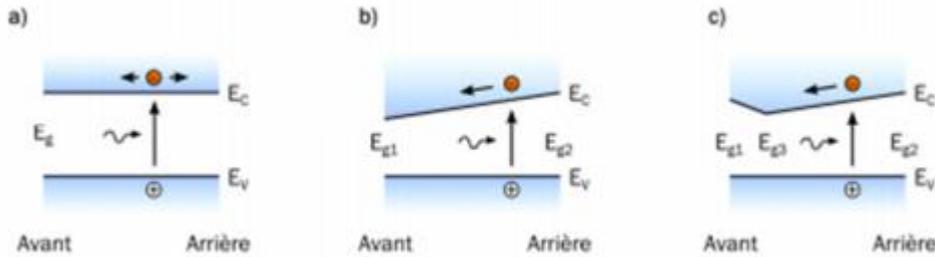
### 3.3.3. Propriétés électroniques :

#### 3.3.3.1 Structure de la bande :

Le CuInSe<sub>2</sub> et le CuGaSe<sub>2</sub> sont des matériaux semi-conducteurs possédant respectivement des gaps directs de 1.035eV et 1.68eV. Cette différence est majoritairement liée à une différence de minimum de la bande conduction (EC) [26]. Comme nous l'avons vu précédemment, le CIGS est une solution solide de ces deux matériaux. Le ratio  $x = [Ga]/([In]+[Ga])$  détermine le taux d'atomes de gallium qui remplacent les atomes d'indium dans la structure. La largeur de

la bande interdite du CIGS varie en fonction de  $x$  entre les valeurs du pur CIS et du pur CGS [27].

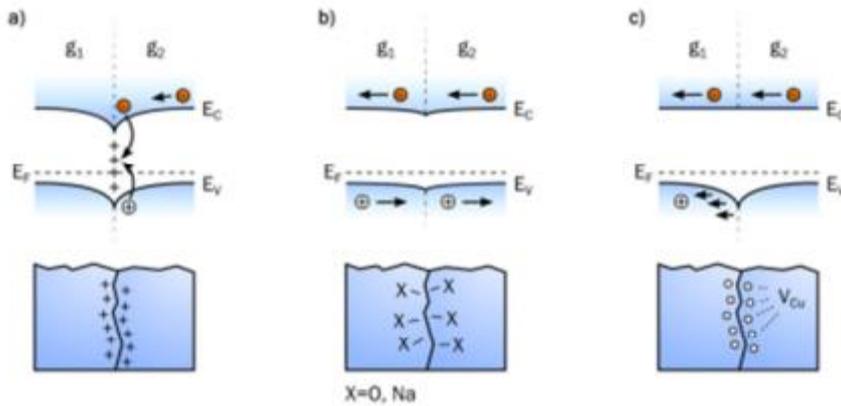
Le CIGS est donc un matériau dont  $E_g$  peut être ajusté entre 1.035eV et 1.68eV en fonction du taux de gallium. La valeur optimale d' $E_g$  dépend de plusieurs facteurs. Du point de vue de l'absorption des photons, il est préférable d'avoir une valeur de  $E_g$  réduite, permettant d'absorber un spectre plus large (plus grandes longueurs d'ondes). Il en résulte un courant plus important délivré par la cellule solaire ( $J_{cc}$ ). Cependant, c'est la valeur de  $E_g$  qui détermine la tension maximale délivrée par la cellule. Afin de maximiser le rendement de conversion, il est donc nécessaire d'obtenir un compromis idéal entre courant et tension. La plupart des résultats expérimentaux publiés dans le domaine des cellules CIGS montrent que les meilleurs rendements sont obtenus avec un gap d'environ 1.2eV [28], ce qui correspond à un taux de Ga proche de 30%. La présence d'un gradient de concentration en Ga dans la couche d'absorbeur permet donc d'obtenir une variation de la bande interdite dans l'épaisseur du matériau. Ce gradient de gap fait l'objet de nombreuses études dans le domaine du CIGS. En effet, il peut être contrôlé dans les procédés usuels de dépôt de CIGS tels que la coévaporation en 3 étapes [29]. La figure II.3 présente les 3 types de gradients de gap principalement rencontrés dans les cellules CIGS. Dans le cas où aucun gradient n'est présent (a), le transport des électrons n'est pas particulièrement influencé par la structure de bandes. Dans le cas dit d'un gradient simple (b), le gap au contact arrière ( $E_{g2}$ ) est plus grand que le gap au contact avant ( $E_{g1}$ ). La différence de potentiel induite facilite ainsi le transport des électrons vers la zone de charge d'espace]. De plus, du fait de la présence d'un plus grand gap au contact arrière, les recombinaisons dans cette même zone sont réduites [30]. Le troisième profil de gap est appelé double gradient (c). Il est en effet composé d'une première zone allant du contact arrière ( $E_{g2}$ ) jusqu'à un gap plus faible ( $E_{g3}$ ). Ce premier gradient présente les mêmes avantages que le profil simple (différence de potentiel et plus large gap au contact arrière). Dans la seconde partie, le gradient est inversé et remonte jusqu'à un gap  $E_{g1}$ . Ce dernier permet d'augmenter le gap effectif à l'hétérojonction et de limiter les recombinaisons à l'interface avec la couche de type n [31]. Ainsi, dans la configuration en double gradient, la valeur du gap minimum ( $E_{g3}$ ) sera déterminante pour l'absorption des photons et donc le courant en court-circuit ( $J_{cc}$ ). De même, les valeurs des gaps maximums ( $E_{g1}$  et  $E_{g2}$ ) influenceront sur la tension en circuit ouvert ( $V_{oc}$ ).



**Figure 9:** principaux types de gradients de bande interdite rencontrés dans les couches de CIGS : a) bandes plates, b) simple gradient, c) double gradient d'après [32]. L'optimisation des gradients de concentration en Ga fait partie des points clés pour atteindre de hauts rendements de conversion avec des cellules à base de CIGS.

### 3.3.3.2 Joints de grains :

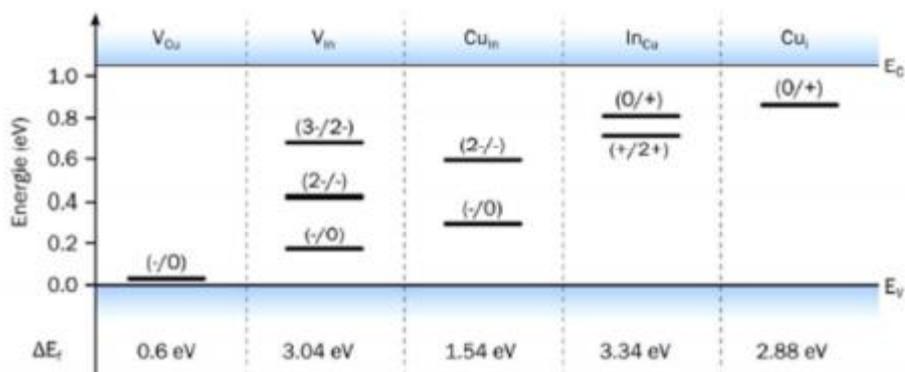
Le CIGS utilisé dans les cellules solaires est polycristallin et possède donc des joints de grains. A ces interfaces, le CIGS présente divers défauts structuraux chargés positivement, principalement des lacunes de sélénium [33]. Ces défauts chargés entraînent localement une courbure des bandes (zone de déplétion) et peuvent devenir une source de recombinaisons. La figure II.4 illustre la structure électronique aux joints de grains dans un tel cas. L'un des intérêts du CIGS est que sa structure électronique aux joints de grains n'est pas particulièrement néfaste pour les performances de la cellule. La première explication vient du fait que les défauts chargés sont passivés par l'apport d'oxygène (exposition à l'air ou recuit) ou de sodium (naturellement présent dans le substrat en verre sodocalcique) dans la couche de CIGS. Cela a pour effet d'inhiber les effets de charge aux joints de grains. Cet effet de passivation est présenté dans la figure II.4-b. Selon un second modèle, le caractère bénin des joints de grains peut être expliqué par la faible teneur en Cu de la surface des grains du CIGS. Cette dernière a été observée de manière précise (tomographie atomique) dans des études récentes [34]. Cela entraîne un abaissement du maximum de la bande de valence par absence d'états électroniques liés aux orbitales du Cu [35]. Il en résulte une barrière aux trous qui permet de limiter les recombinaisons [36]. La figure II.4-c montre la configuration décrite selon ce modèle. Ainsi, il a été démontré que des cellules dont le matériau absorbeur présente de petits grains (donc davantage de joints de grains) pouvaient atteindre des rendements équivalents à des cellules basées sur du CIGS à gros grains [37].



**Figure 10:** structures électroniques possibles aux joints de grains, entre un grain g1 et un grain g2 : a) présence de défauts chargés entraînant une courbure de bandes et des recombinaisons. b) passivation des défauts par l’oxygène ou le sodium. c) présence d’une barrière aux trous dans la bande de valence liée aux lacunes de Cu [38].

### 3.3.3.3 Dopage :

Le CIGS utilisé dans les cellules standard est de type p. Ce dopage est dû à la présence de défauts cristallins générant des états accepteurs (dopage intrinsèque). La figure II.5 récapitule les niveaux d’énergie théoriques correspondant aux principaux défauts cristallins présents dans le CIS. Dans le cas du CIGS, ces valeurs varient dans de faibles proportions en fonction du taux de Ga. Les niveaux accepteurs sont principalement dus aux lacunes de cuivre (VCu) et d’indium (VIn), ainsi qu’aux substitutions d’indium par le cuivre (CuIn). Cependant le dopage p du CIGS est essentiellement lié aux VCu pour deux raisons. Premièrement, ils génèrent un niveau accepteur très proche (0.03 eV) du maximum de la bande de valence. Deuxièmement, leur énergie de formation est la plus favorable ( $\Delta E_f = 0.6\text{eV}$ ). Quant aux défauts générant des niveaux donneurs (InCu et Cui), ils possèdent une énergie de formation beaucoup élevée que les VCu. C’est donc l’abondance de ce dernier défaut dans le CIGS qui est à l’origine de son dopage p.



**Figure 11:** Valeurs théoriques des énergies de transition électronique des principaux défauts cristallins dans le CIS. Les valeurs entre parenthèses indiquent les variations d'état de charge correspondant à chaque niveau.  $\Delta E_f$  est la valeur théorique de l'énergie de formation de chaque défaut dans le cristal [39].

#### 4. Conclusion

Dans le présent chapitre, nous avons présenté les bases fondamentales à la Propriétés générales des composés chalcopyrites, nous avons rappelé quelques notions sur ces Les propriétés électriques et optiques. Nous avons ensuite expliqué le fonctionnement des cellules photovoltaïques et leurs caractéristiques principales.

### Références:

- [1] S. Wagner, J. L. Shay, P. Migliorato, and H. M. Kasper, *Appl. Phys. Lett.* 25 (1974) 434.
- [2] B. R. Pamplin, *Progress in Crystal Growth Charact.* 1 (1979) 331.
- [3] D. Rudmann, Thèse de PhD, Suisse Federal Institute of Technology Zurich, Suisse (2004).
- [4] Ouahida Aissaoui, « Etude des propriétés physiques des couches minces de structure chalcopyrite », thèse de doctorat, université badji mokhtar-Annaba, (Algérie),2011.
- [5] V. V. Lisnyak, N. V. Stus and R. T. Mariychuk, *Solar Energy Materials and Solar Cells.*76, (2003), 553.
- [6] T. Weiss, M. Birkkolz, M. Saad, S. Bleyhl, M. Kunst, A. Jager-Waldau and M. Ch. LuxSteiner, *Journal of Crystal Growth.*198-199, (1999), 1190.
- [7] J. H. Schon, Ch. Kloc, E. Arushanov, G. A. Thomas and E. Bucher, *Journal of Phys. Condens.Matter.* 12, (2000), 4603.
- [8] B. Kuhn, W. Kaefer, K. Fess, K. Friemelt, Ch. Turner, M. Wendl, and E. Bucher, *Phys Stat sol (a).* 162, (1997), 661.
- [9] M. V. Yakushev, A. V. Mudryi, E. Gremenok, E. P. Zaretskaya, V. B. Zalesski, Y. Feofanov and R. W. Martin, *Thin Solid Films.* 451-452, (2004), 133.
- [10] J. R. Tuttle, D. Albin, R. J. Matson and R. Noufi, 20th IEEE, (1988).
- [11] A. E. Becquerel, *Compt. Rend. Acad. Sci.*9, (1839), 561.
- [12] DECHOUCHA Djamel, « Etude des propriétés électronique et optique linéaire pour le chalcopyrite CuAlTe<sub>2</sub> », Mémoire de Master en Electronique, Université Mohamed Boudiaf - M<sup>ˆ</sup>ˆsila, 2015.

## Chapitre : 1 : Généralités sur les matériaux Chalcopyrites

---

[13] Becquerel, E, « Mémoire sur les effets électriques produits sous l'influence des rayons solaires ». Comptes Rendus des Séances Hebdomadaires de l'Académie des Sciences, 1839. 9: p. 561-567.

[14] K. AMARA, Contribution à l'étude d'une conception d'une centrale photovoltaïque de puissance (1MW) interconnectée au réseau de distribution électrique moyenne tension, thèse de magister, université de Tizi- Ouzzou, 2015

[15] M. C. ABDELLI, Etude des cellules photovoltaïques organiques, mémoire de master, université de Tlemcen, 2013. REFERENCES 84.

[16] S. PETIBON, Nouvelles architectures distribuées de gestion et de conversion de l'énergie pour les applications photovoltaïques, thèse de doctorat, université de Toulouse, 2009.

[17] R. G. Lemus, F. B. Hander, C. H. Rodríguez, J.M. Martinez, “ Optical and compositional characterisation of stain-etched porous silicon subjected to anodic oxidation and thermal treatments ”, Mater. Sci. Eng. B, vol 101, 2003, p.249.

[18] F. NEMMAR BELHOCINE, Etude et réalisation de cellules solaires photovoltaïques à base de matériaux organiques, thèse de doctorat, université de Tizi- Ouzzou.

[19] N. Ott, M. Nerding, G. Muller, R. Brendel, and H. P. Strunk, “Evolution of the microstructure during annealing of porous silicon multilayers”, Journal of Applied Physics, vol 95, 2004, p.497.

[20] G. W. El Haj Moussa, M. Ajaka, M. El Tahchi, E. Eid and C. Llinares, Physic State. Solids (a). 202, (2005), 469.

[21] R. R. Philip and B. Pradeep, Thin Solid Films. 472, (2004), 136.

[22] A. Duchatelet, —Synthèse de couches minces de Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> pour cellules solaires par électrodépôt d'oxydes mixtes de cuivre-indium-gallium, thèse PhD, Univ. Lille 1, 2012.

[23] B. Grzeta-Plenkovic and B. Santic, *Journal of Applied Cryst.* 16, (1983), 576.

[24] Ju-heon Yoon, Won-mok Kim, Jong-keuk Park, Young-joon Baik, Tae-yeon Seong, and Jeung-hyun Jeong. “Control of the preferred orientations of Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> films and the photovoltaic conversion efficiency using a surface-functionalized molybdenum back contact”. *Progress in Photovoltaics : Research and Applications*, December 2012.

[25] M A Contreras, K M Jones, L Gedvilas, and R Matson. “Preferred Orientation in Polycrystalline Cu(In, Ga)Se<sub>2</sub> and Its Effect on Absorber Thin-Films and Devices”. In *Proceedings of the 16th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition Glasgow, Scotland, U.K., number May, 2000.*

[26] M. Turcu, I. M. Kotschau, and U. Rau. “Composition dependence of defect energies and band alignments in the Cu(In,Ga)(Se,S)<sub>2</sub> alloy system. *Journal of Applied Physics*, 91(3) pp.1391, 2002.

[27] P. D. Paulson, R. W. Birkmire, and W. N. Shafarman. “Optical characterization of Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> alloy thin films by spectroscopic ellipsometry”. *Journal of Applied Physics*, 94(2), pp. 879, 2003.

[28] Sunghun Jung, SeJin Ahn, Jae Ho Yun, Jihye Gwak, Donghwan Kim, and Kyunghoon Yoon. “Effects of Ga contents on properties of CIGS thin films and solar cells fabricated by co-evaporation technique”. *Current Applied Physics*, 10(4), pp. 990–996, July 2010.

[29] S. Seyrling, A. Chirila, D. Güttler, P. Blösch, F. Pianezzi, R. Verma, S. Bücheler, S. Nishiwaki, Y.E. Romanyuk, and P. Rossbach. “Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> growth process modifications : Influences on microstructure, Na distribution, and device properties”. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 95 :1477–1481, February 2011.

[30] Marianna Kemell, Mikko Ritala, and Markku Leskelä. “Thin Film Deposition Methods for CuInSe<sub>2</sub> Solar Cells”. *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences*, 30(1), pp. 1–31, 2005.

[31] Tokio Nakada. Invited Paper : “CIGS-based thin film solar cells and modules : Unique material properties”. *Electronic Materials Letters*, 8(2), pp. 179–185, April 2012.

[33] U. Rau and H.W. Schock. “Electronic properties of Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> heterojunction solar cells-recent achievements, current understanding, and future challenges”. *Applied Physics A : Materials Science & Processing*, 69(2), pp. 131–147, August 1999.

[34] Pyuck-Pa Choi, Oana Cojocaru-Miredin, RolandWuerz, and Dierk Raabe. “Comparative atom probe study of Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> thin-film solar cells deposited on soda-lime glass and mild steel substrates” . *Journal of Applied Physics*, 110(12), pp. 124513, 2011.

[35] Clas Persson and Alex Zunger. “Anomalous Grain Boundary Physics in Polycrystalline CuInSe<sub>2</sub> : The Existence of a Hole Barrier”. *Physical Review Letters*, 91(26), pp. 266401, December 2003.

[36] Markus Gloeckler, James R. Sites, and Wyatt K. Metzger. Grain-boundary recombination in Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> solar cells. *Journal of Applied Physics*, 98(11), 2005.

[37] Philip Jackson, Roland Würz, Uwe Rau, Julian Mattheis, Matthias Kurth, Thomas Schlötzer, Gerhard Bilger, and Jürgen H. Werner. “High quality baseline for high efficiency, Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> solar cells”. *Progress in Photovoltaics : Research and Applications*, 15(6), pp. 507–519, September 2007.

[38] Su-HuaiWei, S. B. Zhang, and Alex Zunger. “Effects of Ga addition to CuInSe<sub>2</sub> on its electronic, structural, and defect properties”. *Applied Physics Letters*, 72(24), pp. 3199, 1998.

[39] A. Luque, *Practical Handbook of Photovoltaics (Second Edition)*-2012.

### 1. Introduction

La filière industrielle CIGS émerge aujourd'hui dans le domaine photovoltaïque. Cependant des améliorations significatives sont possibles, qui permettraient d'en améliorer encore les performances.

Premièrement, les technologies présentes sur le marché utilisent en général des procédés sous vide, très énergivores et nécessitant des investissements importants en matériel.

Ces techniques sont la co-évaporation ou la pulvérisation cathodique. Des procédés atmosphériques, tels que l'électro dépôt ou l'impression, se développent mais les rendements sont encore inférieurs.

Il faut optimiser le rapport rendement/coût pour développer une technologie atmosphérique efficace. Deuxièmement, un des inconvénients de la filière CIGS reste l'utilisation de métaux rares, tels l'In ou le Ga [1].

Actuellement une filière similaire, basée sur la substitution de l'In et du Ga par de l'étain et du zinc, pour former le composé kesterite  $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S},\text{Se})_4$  (CZTS), se développe [2]. Cette technologie pourrait utiliser les mêmes lignes de production que le CIGS, ce qui peut accélérer son développement.

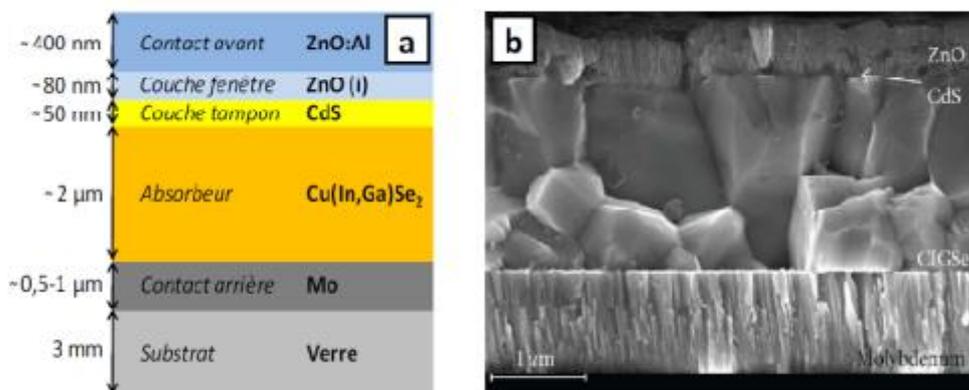
D'autres perspectives, telles que le CIGS ultrafin [3] ou en microcellules sous lumière concentrée [4], permettront également de faire des gains de matière significatifs. Enfin, le recyclage des matériaux se développe [5, 6].

La recherche de méthodes de synthèse à bas-coût du matériau CIGS est donc encore amplement justifiée actuellement.

### 2. Cellules solaires à base de CIGS

#### 2.1. Structure de la cellule solaire en CIGS

Contrairement aux cellules solaires au silicium, les cellules au CIGS sont du type à hétérojonction, c'est-à-dire que les régions p et n sont constituées de matériaux différents. La figure 1 montre une coupe transversale et une coupe vue en microscopie électronique à Balayage (MEB).



**Figure 1** : Structure en coupe d'une cellule CIGS : (a) schéma, (b) Image au microscope à Balayage (MEB) [7].

Celle-ci comporte six couches minces. A l'arrière de la jonction, le substrat en verre sodocalcique (3 mm) et le molybdène (0.5-1 μm) forment le contact ohmique arrière recueillant les trous. La troisième est la couche de CIGS (appelée absorbeur), épaisse d'environ 2 microns.

La quatrième, appelée couche tampon, est une fine couche (de l'ordre de 50 nm) déposée à la surface du CIGS, et constituée de sulfure de cadmium CdS (de type n) ou, de plus en plus souvent, d'oxysulfure de zinc Zn(O,S).

Elle se situe à l'interface avec les couches suivantes à base de ZnO (80 nm de ZnO intrinsèque, puis 0.4 à 1 μm de ZnO dopé Al).

## **Chapitre : 2 : Généralités sur les cellules solaires simple à base de CIGS**

---

La couche de ZnO:Al est dégénérée de type n ( $10^{20} \text{ cm}^{-3}$ ), ce qui permet d'atteindre une conductivité élevée (voisine de  $10^4 \text{ S.cm}^{-1}$ ). La couche en CdS est nécessaire pour assurer de bonnes performances de la cellule solaire.

Elle est utilisée pour permettre une bonne transition électrique et structurale entre la couche en CIGS et la couche en ZnO et d'assurer une réduction du mécanisme de recombinaison à l'interface.

### **2.2. Contact arrière**

Le contact arrière, qui constitue le pôle positif du générateur photovoltaïque, est un métal déposé sur la partie inférieure de l'absorbeur dont le rôle est de collecter les porteurs à partir de l'absorbeur et de les livrer à la charge externe.

Il doit donc, répondre à certains critères chimiques, mécaniques et économiques. De nombreux métaux ont été étudiés comme le Tungstène, le Molybdène, le Chrome, le Tantale, le Manganèse [8], l'Or, l'Aluminium, l'Argent et le cuivre [9].

Parmi ces métaux, le Molybdène qui est le plus couramment utilisé comme contact arrière des cellules solaires CIGS par les laboratoires de recherche et en industrie, en raison de sa stabilité relative aux températures élevées rencontrées lors du procédé de fabrication du CIGS (de l'ordre de 550 à 600 °C), et de sa faible résistance de contact avec le CIGS. Son épaisseur est d'environ 300 nm à 1000 nm.

La méthode de dépôt utilisée est la pulvérisation cathodique. La valeur typique de la résistivité de Mo est de l'ordre  $5 \times 10^{-5} \Omega\text{cm}$  ou moins. De plus, il ne réagit pas avec le CIGS ou y diffuse. En effet, le Mo peut réagir avec le Se lors du dépôt de CIGS pour former une couches de quelques nanomètres du  $\text{MoSe}_2$ .

Par conséquent, la structure CIGS/Mo devient alors CIGS/ $\text{MoSe}_2$ /Mo. Le  $\text{MoSe}_2$  est un semi-conducteur possédant un gap de 1,41 eV [10], il est plus élevé que celui du CIGS est permet ainsi, de diminuer les recombinaisons à l'interface de ces deux couches [11].

## **Chapitre : 2 : Généralités sur les cellules solaires simple à base de CIGS**

---

De plus, il a pour effet de donner un comportement ohmique à l'hétéro contact CIGS/Mo [12, 13]. Mais le problème posé récemment pour le Mo est sa réflectivité relativement faible [51] qui devient un inconvénient lorsque des absorbeurs avec une épaisseur réduite ( $< 2 \mu\text{m}$ ) sont utilisés. c.à.d. dans le cas où les photons incidents, avec des énergies plus grandes que la largeur de bande, ne peuvent pas être absorbés dans un seul passage dans l'absorbeur.

### **2.3. Absorbeur**

L'absorbeur est la partie de la cellule dans laquelle les photons vont être convertis en paires électrons-trous. Dans le cas présent, il s'agit d'un semi-conducteur de type P de la famille I-III-VI, dont les différentes variantes déjà étudiées conduisent à la formule générale suivante:  $(\text{Cu}, \text{Ag}) (\text{In}, \text{Ga}, \text{Al}) (\text{Se}, \text{S}, \text{Te})_2$ .

La substitution du Cu par de l'argent, de l'indium par du gallium ou de l'aluminium, du sélénium par du soufre ou du tellure, permet de modifier les propriétés du matériau comme sa largeur de bande interdite. Le composé le plus développé en recherche et en industrie, et qui constitue le sujet de notre étude, est le  $\text{Cu} (\text{In}, \text{Ga}) \text{Se}_2$  [14].

### **2.4. Couche tampon**

La couche tampon est un semi-conducteur ayant une conductivité de type n dont le gap doit être supérieur à celui de l'absorbeur. Deux rôles lui sont majoritairement attribués : un rôle électrique, et un rôle de couche protectrice.

Du point de vue électrique, cette couche adapte la largeur de la bande interdite entre l'absorbeur et la couche fenêtre [15] et limite les recombinaisons des porteurs à l'interface de ces deux couches. Elle permet également de protéger la surface de l'absorbeur lors du dépôt par pulvérisation cathodique de la couche de ZnO, qui peut engendrer des défauts à la surface du CIGS [16].

Plusieurs semi-conducteurs de type n dont les bandes interdites sont entre 2,0 et 3,6 eV ont été appliquées comme tampon pour les cellules solaires CIGS. Cependant, le CdS déposé par bain chimique (CBD) reste le préféré car il donne toujours des hauts rendements [17, 18,19].

## **Chapitre : 2 : Généralités sur les cellules solaires simple à base de CIGS**

---

Néanmoins, sa largeur de bande interdite, égale à 2,4 eV relativement faible engendre des pertes optiques, de sorte que des quantités importantes de lumière sont absorbées avant de pouvoir atteindre la couche CIGS, même pour les couches de CdS aussi minces que 50 nm.

Les photons absorbés dans le CdS ne contribuent pas au photocourant, à cause de la petite longueur de diffusion des porteurs minoritaires (trous) dans le CdS, ce qui conduit à un taux élevé de recombinaison.

Pour cette raison, et en plus des contraintes liées à l'utilisation du Cadmium (Cd) qui est un élément toxique, de nombreuses études sont menées pour substituer le CdS par d'autres matériaux, parmi eux, on peut citer (OH, S), Zn (O, OH), ZnS [20,24] ou ZnSe [24-26].

### **2.5. Couche fenêtre**

La couche fenêtre doit être à la fois transparente, afin de laisser suffisamment de lumière à la région de jonction et la couche absorbante du dispositif, et conductrice pour permettre le transport du photo-courant généré au circuit extérieur sans trop de pertes.

Cette couche fenêtre est constituée d'oxyde transparent conducteur (TCO), sur lequel une fine grille métallique doublée (Ni-Al) est déposée de façon à réduire la résistance série de la couche fenêtre et de collecter les charges générées par le dispositif.

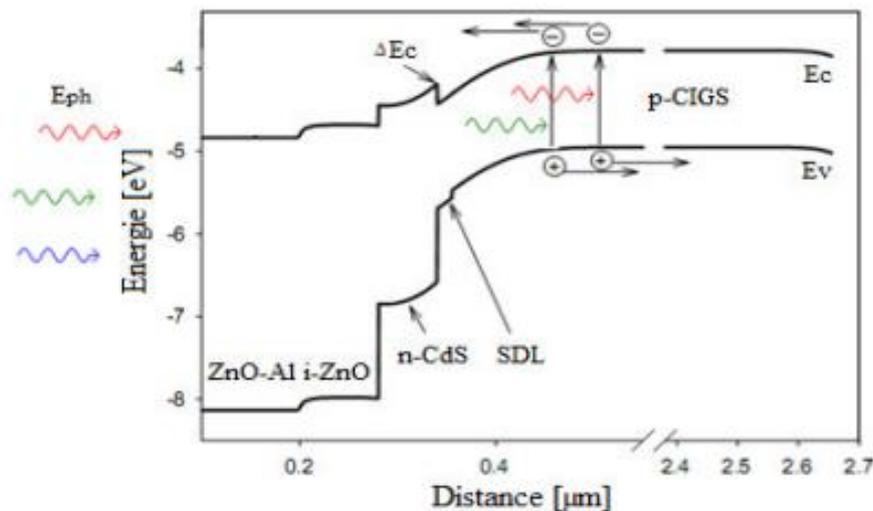
Le Ni sert de couche d'accroche et permet d'éviter l'oxydation de l'Al liée à la présence sous-jacente du TCO. Le TCO, généralement utilisé pour les cellules CIGS, est l'oxyde de Zinc (ZnO) déposé par pulvérisation cathodique, mais l'oxyde d'Indium dopé à l'étain (ITO) peut également être rencontré [27].

Une bicouche ZnO est souvent utilisée pour le contact frontal transparent. La première couche est une couche mince de ZnO intrinsèque (i-ZnO), qui est typiquement de (50 -100 nm) d'épaisseur et très résistive. Elle sert à limiter la formation de court-circuit dans les zones présentant un recouvrement imparfait du CIGS par la couche tampon [28]. La seconde couche est fréquemment du ZnO dopé à l'Aluminium (ZnO: Al), mais d'autres dopants comme le Bore (ZnO: B) [63] ou le Gallium (ZnO: Ga) [64] existent aussi.

## Chapitre : 2 : Généralités sur les cellules solaires simple à base de CIGS

L'épaisseur et le dopage de cette couche sont ajustés de façon à combiner transparence et conductivité. La bande interdite de la couche fenêtre doit être aussi élevée et aussi mince que possible afin de maintenir une faible résistance série. Le ZnO et le ZnO: Al ont respectivement des bandes d'environ 3,2 eV et 3,6 à 3,8 eV. VI.3.6. Jonction p-n La jonction p-n dans les cellules solaires CIGS est formée entre le semi-conducteur type p (CIGS) et le type n (CdS).

Le diagramme d'énergie de bande de cette cellule est représenté sur la figure 2. La différence des affinités électroniques des deux matériaux constituant la jonction se traduit par une discontinuité de bande interdite. La courbure de la bande de conduction ou  $\Delta E_c$  (Conduction Band Offset) entre le CIGS et le CdS est par convention positive, ce qui signifie que la bande de conduction de CdS est supérieure à celle de CIGS.



**Figure 2:** Structure de bande d'une cellule solaire Cu (In, Ga) Se<sub>2</sub>[29].

La valeur optimale de la courbure de la bande de conduction est  $\Delta E_c = 0,3$  eV est obtenue pour un gap de CIGS=1,15 eV. Une courbure de la bande de conduction supérieure à 0,5 eV crée une barrière forte pour les électrons photo- générés limitant ainsi, le transport du courant. En revanche, une courbure de la bande de conduction nulle ou négative conduit à une augmentation de la recombinaison à l'interface, ce qui limite la tension de la cellule.

## Chapitre : 2 : Généralités sur les cellules solaires simple à base de CIGS

La présence d'une couche de type inversé (type n) identifiée comme étant une couche de défauts de surface ou SDL (Surface Defect Layer) à la surface du matériau CIGS était rapportée par plusieurs auteurs. Elle possède un gap plus large que le CIGS, ce qui permet de réduire la recombinaison à l'interface CdS/CIGS et contribue ainsi à l'amélioration des performances de la cellule.

### 3. Diagramme de bandes d'une cellule solaire en CIGS

La figure 3 montre le diagramme de bandes associé aux cellules CIGS. La jonction électrique est formée par le contact entre le CIGS de type p et les couches CdS/ZnO de type n.

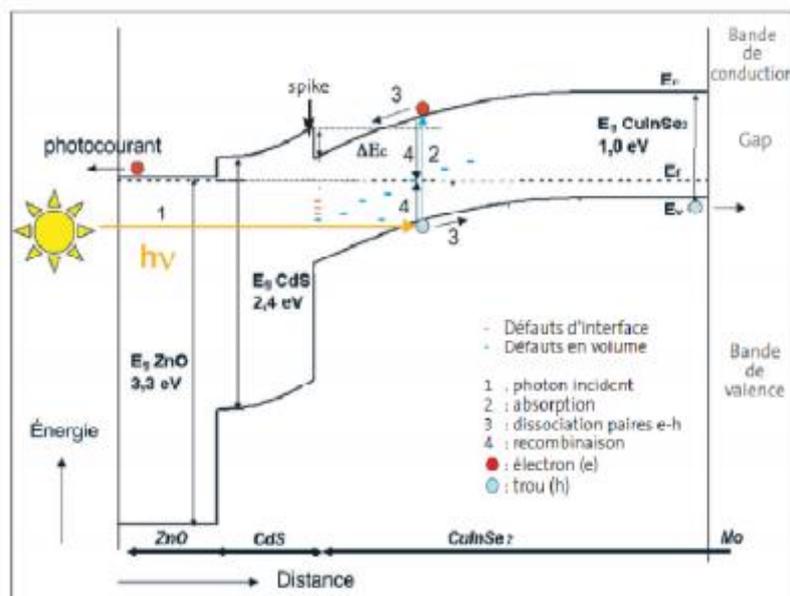


Figure 3 Diagramme de bandes d'une cellule CIGS/CdS/ZnO [30].

Au voisinage de l'interface CIGS/CdS, les bandes d'énergie sont courbées par la variation du potentiel électrostatique à travers la jonction p-n. L'interface entre CIGS et couche tampon présente une discontinuité d'énergie positive au niveau de la bande de conduction du CIGS.

## **Chapitre : 2 : Généralités sur les cellules solaires simple à base de CIGS**

---

Cette discontinuité doit posséder une hauteur optimale pour les performances des dispositifs : trop haute, elle s'oppose au passage des électrons photogénérés, réduisant le photocourant; trop basse, voire négative, elle augmente le courant d'obscurité et les pertes par recombinaison.

La couche de ZnO intrinsèque complète la couche tampon sur le plan électrique, en évitant le contact direct avec le ZnO:Al électriquement dégénéré. Du fait des largeurs de bande interdite élevées, les couches de ZnO et tampon laissent passer le rayonnement visible (d'où leur nom de couches fenêtre), qui est ensuite absorbé dans la couche de CIGS.

Les caractéristiques des cellules vont donc, au final, dépendre étroitement de celles des couches individuelles et de leurs interfaces.

L'augmentation, par exemple, de la largeur de bande interdite du CIGS va s'accompagner d'une augmentation de la tension de circuit ouvert au détriment du photocourant. Contrairement aux cellules au silicium, il s'agit d'un dispositif de type hétérojonction.

Le photocourant est généré dans le CIGS, puis traverse les couches de CdS/ZnO, contrairement au silicium où la couche n contribue au photocourant. L'avantage de l'hétérojonction est de limiter les pertes optiques dans la zone n d'une homojonction classique.

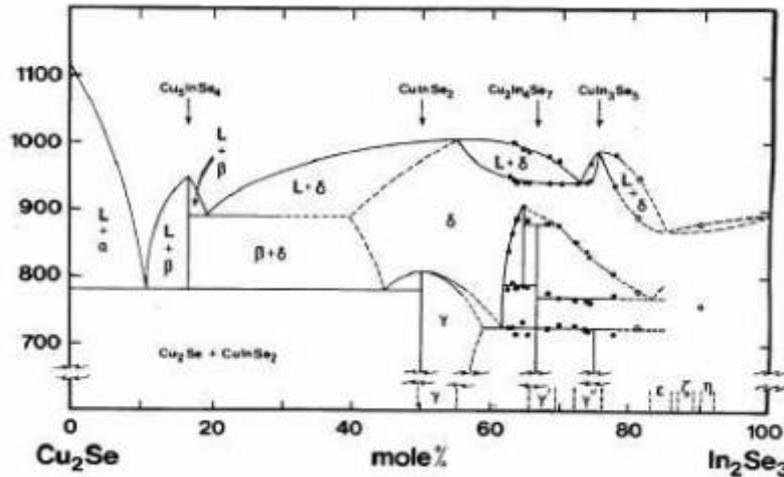
### **3.1. Diagramme de phase du CuInSe<sub>2</sub>**

Le diagramme de phase du couple Cu<sub>2</sub>Se-In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> pour des températures entre 600 et 1200 °C est représenté dans la figure 1.5. Les diagrammes de phase du système ternaire (Cu-In-Se) ont été étudiés par de nombreux auteurs.

Mais l'attention a été orientée vers le diagramme de phase des composés binaires Cu<sub>2</sub>Se et In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> développés par Fearheiley [31], car il y a un intérêt particulier sur les phases existantes à la température ambiante le long de la ligne d'attache Cu<sub>2</sub>Se-In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>.

## Chapitre : 2 : Généralités sur les cellules solaires simple à base de CIGS

En effet, le point de fusion de CIS a été trouvé d'être 987°C avec une transition de phase de l'état sphalérite au-dessus de 810°C à l'état chalcopyrite au-dessous de 810°C. La figure 4 montre le diagramme de phase pseudo-binaire du composé  $\text{CuInSe}_2$ .



**Figure 4** Diagramme de phase pseudo-binaire de  $\text{Cu}_2\text{Se}-\text{In}_2\text{Se}_3$  [32].

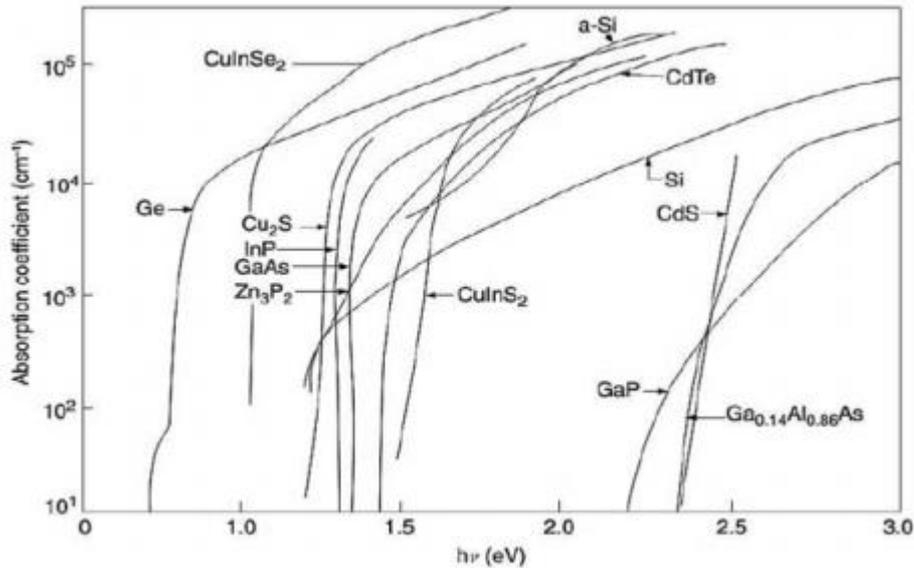
Dans la plupart des cas, les phases secondaires qui sont riches en Cu et en In se manifestent comme des défauts électriquement actifs apparaissant dans le gap de couche et affectent les performances du composant électronique à base de ce semiconducteur.

Dans le diagramme de phase, il apparaît que les phases ternaires  $\text{Cu}_2\text{In}_4\text{Se}_7$ ,  $\text{Cu}_3\text{In}_5\text{Se}_9$ ,  $\text{CuIn}_3\text{Se}_5$ ,  $\text{Cu}_5\text{InSe}_4$  et  $\text{CuIn}_5\text{Se}_8$  sont susceptibles de se produire. Les phases  $\gamma$ ,  $\gamma'$ ,  $\gamma''$ , sont, respectivement, associées aux  $\text{CuInSe}_2$ ,  $\text{Cu}_2\text{In}_4\text{Se}_7$ , et  $\text{CuIn}_3\text{Se}_5$ , et donc la phase  $\text{CuInSe}_2$  sous sa structure chalcopyrite s'étend d'une composition stœchiométrique de 50 mol % de  $\text{InSe}_3$  à une composition riche en indium de 55 mol %, environ d' $\text{In}_2\text{Se}_3$ . Les rapports atomiques (Cu/In) correspondants à cette monophasse sont compris entre 0.82 et 1.

Dans le cas où le rapport atomique (Cu/In) est supérieur à 1, le matériau pourrait contenir une phase secondaire du type  $\text{Cu}_2\text{Se}$ , et dans le cas où le rapport atomique (Cu/In) est inférieur à 0.82, le matériau pourrait contenir des phases secondaires de types  $\text{Cu}_2\text{In}_4\text{Se}_7$  et  $\text{CuIn}_3\text{Se}_5$ .

### 3.2. Propriétés optiques

Le coefficient d'absorption de  $\text{CuInSe}_2$  est très élevé et supérieur à  $10^5 \text{ cm}^{-1}$  dans le domaine du visible et le proche infrarouge (figure 6).



**Figure 5** Coefficient d'absorption des matériaux  $\text{CuInSe}_2$ ,  $\text{CdTe}$ ,  $\text{GaAs}$ ,  $\text{a-Si : H}$ , mono- $\text{Si}$  et  $\text{CdS}$  [34].

Dans de nombreuses études, il a été démontré que le coefficient d'absorption  $\alpha$  en fonction du gap optique  $E_g$  est décrit par :

$$\alpha = A (E - E_G)^{1/2} / E$$

Avec  $A$ , une constante de proportionnalité, qui dépend des densités des états liés à l'absorption de photon et  $E$  l'énergie de l'irradiation.

Le gap optique de  $\text{CuInSe}_2$  est direct, l'énergie du gap varie en fonction de la température et elle est décrite par la relation proposée par:

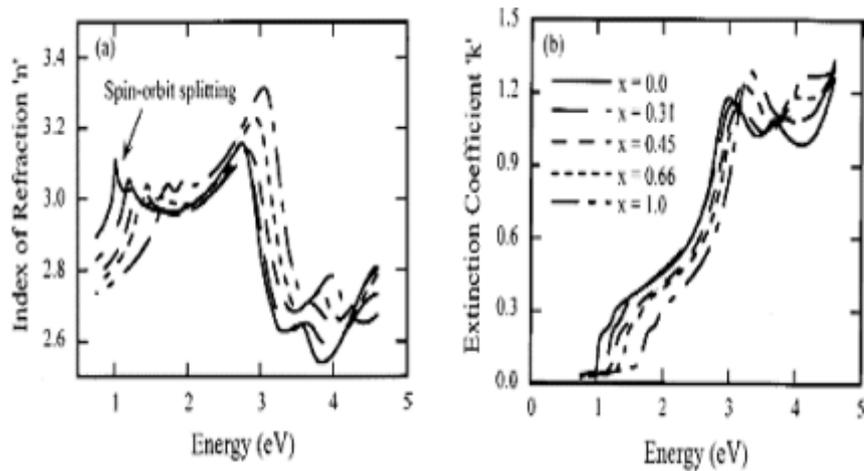
$$E_g(T) = E_g(0) - aT^2 / (b + T)$$

Où  $a$  et  $b$  sont des constantes. En général,  $dE_g / dT$  est de l'ordre de  $-2 \times 10^{-4} \text{ eV/K}$ .

## Chapitre : 2 : Généralités sur les cellules solaires simple à base de CIGS

Des études ont été effectuées sur le  $\text{Cu}(\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x)\text{Se}_2$  pour différentes compositions de  $x=\text{Ga}/(\text{Ga}+\text{In})$  entre 0 à 1. Les courbes de la figure 7 décrivent l'indice de réfraction complexe,  $n+ik$ , pour  $x=0$  et 0.2. On peut utiliser l'indice de réfraction pour calculer d'autres paramètres optiques tels que le coefficient d'absorption  $\alpha$ .

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda}$$



**Figure 6** Indice de réfraction complexe de  $\text{CuInSe}_2$  et  $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$  [34].

La largeur de la bande interdite du  $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$  varie en fonction de  $x$  entre les valeurs des énergies de gap du  $\text{CuInSe}_2$  et du  $\text{CuGaSe}_2$ , suivant la loi empirique suivante [35] :

$$E_g(T) = 1,035 + 0,65x - 0,264 x (1 - x)$$

Le CIGS est donc un matériau dont  $E_g$  peut être ajusté entre 1.035 eV et 1.68 eV en fonction du taux de gallium  $x$ .

### 3.4. Dopage

Le CIGS utilisé dans les cellules solaires est de type p. Ce dopage est dû à la présence de défauts cristallins générant des états accepteurs (dopage intrinsèque). Les niveaux d'énergie théoriques correspondant aux principaux défauts cristallins présents dans le CIGS varient en fonction du taux de Ga.

## Chapitre : 2 : Généralités sur les cellules solaires simple à base de CIGS

Les états accepteurs sont principalement dus aux lacunes de cuivre et d'indium, ainsi qu'aux substitutions d'indium par le cuivre. Cependant le dopage p du CIGS est essentiellement lié aux lacunes de cuivre. C'est donc l'abondance de ce dernier défaut dans le CIGS qui est à l'origine de son dopage p.

### 4. Filières photovoltaïques

Différentes technologies sont aujourd'hui utilisées dans la filière photovoltaïque. La figure 7 présente les évolutions des rendements des différentes filières. Nous pouvons observer qu'à ce jour, les plus hauts rendements sont obtenus avec les cellules III-V multijonction sous concentration, tandis que les plus faibles rendements sont obtenus avec les cellules solaires organiques [36].

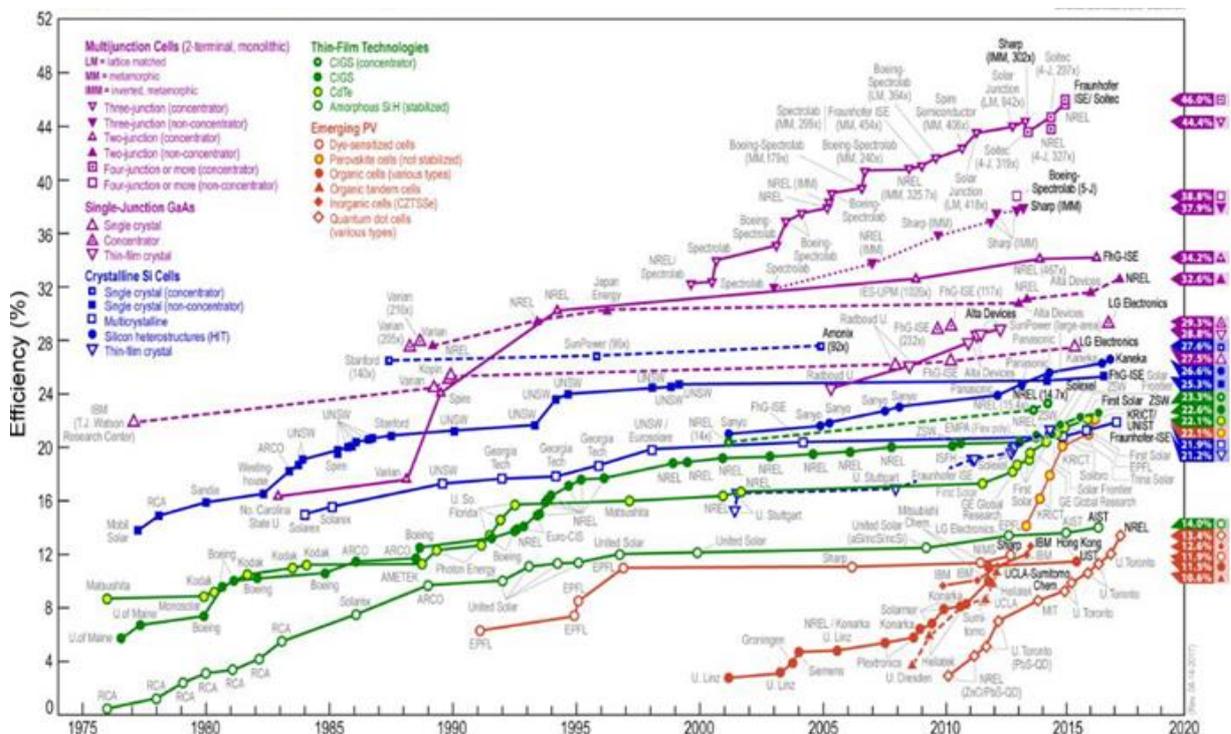


Figure 7 Évolution en laboratoire du rendement des cellules photovoltaïques [36].

### 5. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté l'évolution des cellules solaires, leur principe de base de fonctionnement. Nous avons également, décrit les propriétés électriques et optiques du matériau utilisé dans ce travail à savoir : le  $\text{CuInGaSe}_2$  (CIGS) ainsi que les propriétés constituant la cellule solaire.

### Références:

- [1] Fthenakis, V., « Sustainability of photovoltaics: The case for thin-film solar cells ». *Renewable & Sustainable Energy Reviews*, 2009. 13(9): p. 2746-2750.
- [2] Mitzi, D.B., O. Gunawan, T. Todorov, K. Wang, and S. Guha, « The path towards a high-performance solution-processed kesterite solar cell » *Solar Energy Materials & Solar Cells*, 2011. 95: p. 1421-1436.
- [3] Jehl, Z., F. Erfurth, N. Naghavi, L. Lombez, I. Gerard, M. Bouttemy, P. Tran-Van, A. Etcheberry, G. Voorwinden, B. Dimmler, W. Wischmann, M. Powalla, J.F. Guillemoles, and D. Lincot, « Thinning of CIGS solar cells: Part II: Cell characterizations ». *Thin Solid Films*, 2011. doi:10.1016/j.tsf.2010.12.224.
- [4] Paire, M., L. Lombez, J.F. Guillemoles, and D. Lincot, « Toward microscale Cu(In, Ga)Se<sub>2</sub> solar cells for efficient conversion and optimized material usage: Theoretical evaluation ». *Journal of Applied Physics*, 2010. 108(3): p. 034907.
- [5] Fthenakis, V.M., « End-of-life management and recycling of PV modules ». *Energy Policy*, 2000. 28(14): p. 1051-1058.
- [6] Miles, R.W., K.M. Hynes, and I. Forbes, « Photovoltaic solar cells: An overview of state-of-the-art cell development and environmental issues ». *Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials*, 2005. 51(1-3): p. 1-42.
- [7] Aurelien Duchatelet, "Synthèse de couches minces de Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> pour cellules solaires par électrodépôt d'oxydes mixtes de cuivre-indium-gallium", thèse de doctorat, (2012), Université LILLE 1.
- [8] K. Orgassa, H. W. Schock and J. H. Werner, « Alternative back contact materials for thin film Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> solar cells », *Thin Solid Films*, Vol. 431–432, 2003, pp. 387.
- [9] R. J. Matson, O. Jamjoum, A. D. Buonaquisti, P. E. Russell, L. L. Kazmerski, P. Sheldon and R. K. Ahrenkiel, « Metal contacts to CuInSe<sub>2</sub> », *Solar cells*, Vol. 11, 1984, pp. 301.

## **Chapitre : 2 : Généralités sur les cellules solaires simple à base de CIGS**

---

[10] N. Kohara, S. Nishiwaki, Y. Hashimoto, T. Negami and T. Wada, « Electrical properties of the Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub>/ MoSe<sub>2</sub>/Mo structure », Solar Energy Materials and Solar Cells, Vol. 67, 2001, pp. 209.

[11] M. Kemell, M. Ritala and M. Leskelä, « Thin Film Deposition Methods for CuInSe<sub>2</sub> Solar Cells », Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences, Vol. 30, 2005, pp. 1.

[12] M. Powalla and B. Dimmler, « Scaling up issues of CIGS solar cells », Thin Solid Films, Vol. 361–362, 2000, pp. 540.

[13] A. Luque, « Practical Handbook of Photovoltaics (Second Edition) », 2012.

[14] A. Duchatelet, « Synthèse de couches minces de Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> pour cellules solaires par électro dépôt d'oxydes mixtes de cuivre-indium-gallium », Thèse de Doctorat, université de Lille1, 2012.

[15] M. Buffiere, « Synthèse et caractérisation de couches minces de Zn(O,S) pour application au sein des cellules solaires à base de Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> », Thèse de doctorat, université de Nantes, 2011. Chapitre I : Etat de l'art des cellules photovoltaïques à base de CIGS 34.

[16] N. Naghavi, D. Abou-Ras, N. Allsop, N. Barreau, S. Bücheler, A. Ennaoui, C.H. Fischer, C. Guillen, D. Hariskos, J. Herrero, R. Klenk, K. Kushiya, D. Lincot, R. Menner and T. Nakada, « Buffer layers and transparent conducting oxides for chalcopyrite Cu(In,Ga)(S,Se)<sub>2</sub> based thin film photovoltaics : present status and current developments », Progress in Photovoltaics: Research and Applications, Vol.18, 2010, pp. 411.

[17] P. Jackson, D. Hariskos, E. Lotter, S. Paetel, R. Wuerz, R. Menner, W. Wischmann and M. Powalla, « New world record efficiency for Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> thin-film solar cells beyond 20% », Progress in Photovoltaics: Research and Applications, Vol. 19, 2011, pp 894.

[18] I. Repins, M. A. Contreras, B. Egaas, C. DeHart, J. Scharf, C. L. Perkins, B. To and R. Noufi, « 19.9%-efficient ZnO/CdS/CuInGaSe<sub>2</sub> Solar Cell with 81.2% Fill Factor », Progress in Photovoltaics: Research and Applications, Vol. 16, 2008, pp. 235.

## **Chapitre : 2 : Généralités sur les cellules solaires simple à base de CIGS**

---

- [19] E. Wallin, U. Malm, T. Jarmar, O. Lundberg, M. Edoff and L. Stolt, « World-record Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub>-based thin-film sub-module with 17.4% efficiency », Progress in Photovoltaics: Research and Applications, Vol. 20, 2012, pp. 851.
- [20] A. Romeo, M. Terheggen, D. Abou-Ras, D. L. Batzner, F. J. Haug, M. Kalin, D. Rudmann and A. N. Tiwari, « Development of thin-film Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> and CdTe solar cells », Progress in Photovoltaics: research and Applications, Vol. 12, 2004, pp. 93.
- [21] M. Kemell, M. Ritala and M. Leskelä, « Thin Film Deposition Methods for CuInSe<sub>2</sub> Solar Cells », Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences, Vol. 30, 2005, pp. 1.
- [22] C. H. Fischer, M. Bär, T. Glatzel, I. Lauer mann, and M. C. Lux-Steiner, « Interface engineering in chalcopyrite thin film solar devices », Solar energy materials and solar cells, Vol. 90, 2006, pp. 1471.
- [23] T. Nakada, Y. Hirabayashi, T. Tokado, D. Ohmori and T. Mise, « Novel device structure for Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> thin film solar cells using transparent conducting oxide back and front contacts», Solar Energy, Vol. 77, 2004, pp. 739.
- [24] U. Rau, P. O. Grabitz and J. H. Werner, « Resistive limitations to spatially inhomogeneous electronic losses in solar cells », Applied Physics Letters, Vol. 85, 2004, pp. 6010. Chapitre I : Etat de l'art des cellules photovoltaïques à base de CIGS 35.
- [25] Y. Hagiwara, T. Nakada and A. Kunioka, « Improved J<sub>sc</sub> in CIGS thin film solar cells using a transparent conducting ZnO:B window layer », Solar Energy Materials and Solar Cells, Vol. 67, 2001, pp. 267.
- [26] B. Sang, K. Kushiya, D. Okumura and O. Yamase, « Performance improvement of CIGSbased modules by depositing high-quality Ga-doped ZnO windows with magnetron sputtering », Solar Energy Materials and Solar Cells, Vol. 67, 2001, pp. 237.
- [27] D. Schmid, M. Ruckh, F. Grunwald and H. W. Schock, « Chalcopyrite/defect chalcopyrite heterojunctions on the basis of CuInSe<sub>2</sub> », Journal of Applied Physics, Vol. 73, 1993, pp. 2902.

## **Chapitre : 2 : Généralités sur les cellules solaires simple à base de CIGS**

---

[28] Y. Yan, K. M. Jones, J. Abushama, M. Young, S. Asher, M.M. Al-Jassim and R. Noufi, « Microstructure of surface layers in Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> thin films », Applied Physics Letters, Vol. 81, 2002, pp.1008.

[29] S. M. Lee, S. Ikeda, Y. Otsuka, W. Septina, T. Harada and M. Matsumura, « Homogeneous Electrochemical deposition of in ona Cu-covered Mo Substrate for fabrication of efficient solar cells with a CuInS<sub>2</sub> photo absorber », Electrochimica Acta, Vol. 79, 2012, pp.189.

[30][www.refletsdelaphysique.fr/articles/refdp/pdf/2007/03/refdp\\_5.pdf](http://www.refletsdelaphysique.fr/articles/refdp/pdf/2007/03/refdp_5.pdf).

[31] M.L. Fearheiley, Sol. Cells 16 (1986) 91.

[32] Satour Fatima Zohra, "Application de la spectroscopie de photoacoustique dans l'analyse des propriétés optiques des effets d'implantation de Ne<sup>+</sup> et de Xe<sup>+</sup> dans CuInSe<sub>2</sub>", Thèse de doctorat, Université de Sétif, 2012.

[33] Assia Bouraiou, "Elaboration et Caractérisation des Couches Minces CuInSe<sub>2</sub> par Électrodéposition", thèse de doctorat, université de Constantine, 2009.

[34] Antonio Luque, Steven Hegedus, Handbook of photovoltaic science and engineering, Second Edition, John Wiley & Sons, Ltd, 2011.

[35] P. D. Paulson, R. W. Birkmire, and W. N. Shafarman. Journal of Applied Physics, 94(2):879, 2003.

[36] I. S. E. Fraunhofer. Photovoltaics report. Fraunhofer ISE, Freiburg, 2017. 1, 12, 13,15

### **I- Introduction**

La chalcopyrite naturelle est caractérisée par une structure similaire au semi-conducteur de type n. C'est pourquoi il est pas prévu d'atteindre un courant considérable à faible anodique potentiels jusqu'à ce qu'un potentiel de « rupture » soit atteint. Cette caractéristique est très rencontrée en électrochimie, où les courants faibles sont donnés à un potentiel jusqu'à 1,0 V.

La capacité, les courants de limitation et les photocourants sont également les caractéristiques de la chalcopyrite [1]. Hadjab et al. [2] ont examiné les composants électroniques et structurels caractéristiques du matériau semi-conducteur chalcopyrite Cuivre-Indium-Gallium-Sélénium.

Ils ont rapporté que le matériau étudié est très approprié dans le photovoltaïque et systèmes optoélectroniques [2]. Madhuri et al. [3] a indiqué que  $\text{CuIn}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{Se}_2$  (CIGS) est un matériau absorbant renommé qui peut être très efficace dans les cellules solaires. Son efficacité de 22,6% est considérés comme très compétitive par rapport aux cellules solaires à base de silicium.

Les nanoparticules CIGS sont connues par leur surface importante pour rapport volumique et peut être utilisé dans les systèmes photovoltaïques à faible Température. Mandati et Sarada [4] ont utilisé le courant pulsé dépôt électrochimique pour fabriquer des films CIGS. Ramasamy et al. [5] ont illustré dans leurs travaux que les films minces de chalcopyrite  $\text{CuIn}_{(1-x)}\text{Ga}_x\text{Se}_2$  (CIGS) sont photo électro chimiquement actifs avec une conductivité de type p. Kotbi et al. [6] ont confirmé que la couche mince  $\text{CuInGaS}_2$  (CIGS) les films ont une structure de chalcopyrite.

Leur analyse a montré que l'augmentation de la proportion de gallium entraîne une augmentation de l'énergie de bande interdite optique des films dans la plage [1,50-1,56] eV et une augmentation des propriétés électriques dans la résistivité de la nappe. Sheu et al. [7] ont déterminé les caractéristiques structurelles des couches minces polycristallines CIGS par faire varier le rapport  $\text{Cu}/(\text{In}+\text{Ga})$  à l'aide d'une co-évaporation technique.

## **Chapitre : 3 : Simulation des cellules solaires à base de CIGS par le SCAPS**

---

La famille des chalcopyrites est bien connue par leurs performances significatives pour les cellules solaires, comme le rapporte JägerWaldau [8]. Les chalcopyrites permettent une émission/laser stimuléeaction, car ils montrent des bandes interdites directes et étroites bandes luminescentes. Tai et al. [9] a obtenu des performances de 22,3 % avec des cellules solaires Cu (In, Ga) (Se, S)<sub>2</sub>.

En général, les couches PV CIGS sont fabriquées dans des conditions considérables températures (> 450°C) [10]. Akhavan et al. [11] employéLes nanocristaux CIGS et leur technique ont permis une puissance de 3,1%efficacité de conversion.La structure du CIGS est la chalcopyrite à pression ambiante.Pluengphon et al. [12] ont proposé la phase haute pressiontransitions similaires à celles des transitions de phase CuInSe<sub>2</sub>.Lara-Lara et Fernández [13] ont rapporté que la performancedu semi-conducteur Cu (In, Ga) Se<sub>2</sub> (CIGS) dans le photovoltaïquesystème dépasse 20 % par le dépôt physique en phase vapeur. Ilsont également signalé qu'il existe différentes approches pourCouche absorbante CIGS, et la technique d'électrodéposition estle plus adapté à de nombreux aspects économiques et techniques pour le faire pour différentes techniques et raisons.

### **II-Présentation du logiciel de simulation scaps**

La simulation des cellules en couches minces est devenue de plus utilisée ces dernières années, ainsi, plusieurs logiciels de calcul et de simulation ont été développés par la communauté des chercheurs dans ce domaine. On peut citer les logiciels AMPS-1D, PC-1D, ASA, SCAPS-1D, SILVACO ....

SCAPS (solar cell capacitance simulator) est un logiciel de simulation numérique des cellules solaires en couches minces à hétérojonction. Il a été développé à l'université de Gent en Belgique avec LabWindows/ CVI de National Instruments par Marc Burgelman et al [14].Il a été mis à disposition à l'université chercheuse dans la communauté photovoltaïque après la deuxième PV de la Conférence mondiale de Wine, 1998.

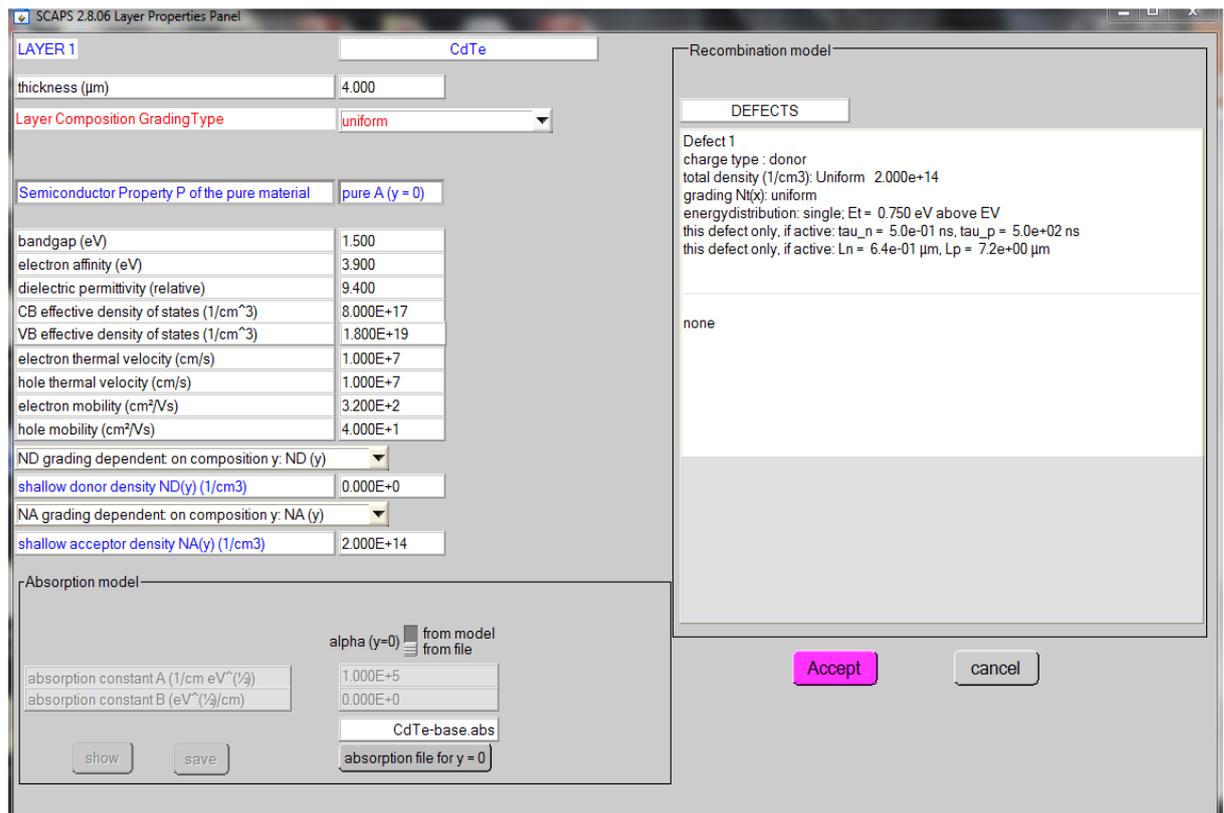
Le programme SCAPS 1-D résout les équations pour des structures contenant un certain nombre de couche semi-conducteur qui ont un profil de dopage arbitraire (comme fonction de la position), avec une distribution énergétiques arbitraires des niveaux profonds des donneurs ou des accepteurs sous différents types d'éclairément.

## Chapitre : 3 : Simulation des cellules solaires à base de CIGS par le SCAPS

Des itérations de résolutions des équations sont faites jusqu'à convergence de l'algorithme. SCAPS 1-D a été introduit dans la littérature avec les articles [15][16]. Alors que les algorithmes de SCAPS sont détaillés dans les références [17]

SCAPS est originellement développé pour les structures de cellules de famille CuInSe<sub>2</sub> et CdTe. Cependant, plusieurs extensions ont amélioré ses capacités de façon à devenir applicable pour les cellules solaires cristallines (de la famille Si et GaAs), ainsi que les cellules solaires amorphes (a-Si et les micro-morphes Si). Les applications de la simulation en utilisant SCAPS peuvent être consultées dans les références [18][19]

L'utilisation de SCAPS est très pratique, il permet de simuler n'importe quelle structure photovoltaïque, selon les matériaux disponibles en fichiers data, en jouant sur les paramètres variables (largeur, surface, dopage, etc...), la fenêtre du logiciel pour écrire ces paramètres est représentée sur la figure 1.



**Figure 1:** Fenêtre du logiciel SCAPS pour écrire les paramètres d'une cellule.

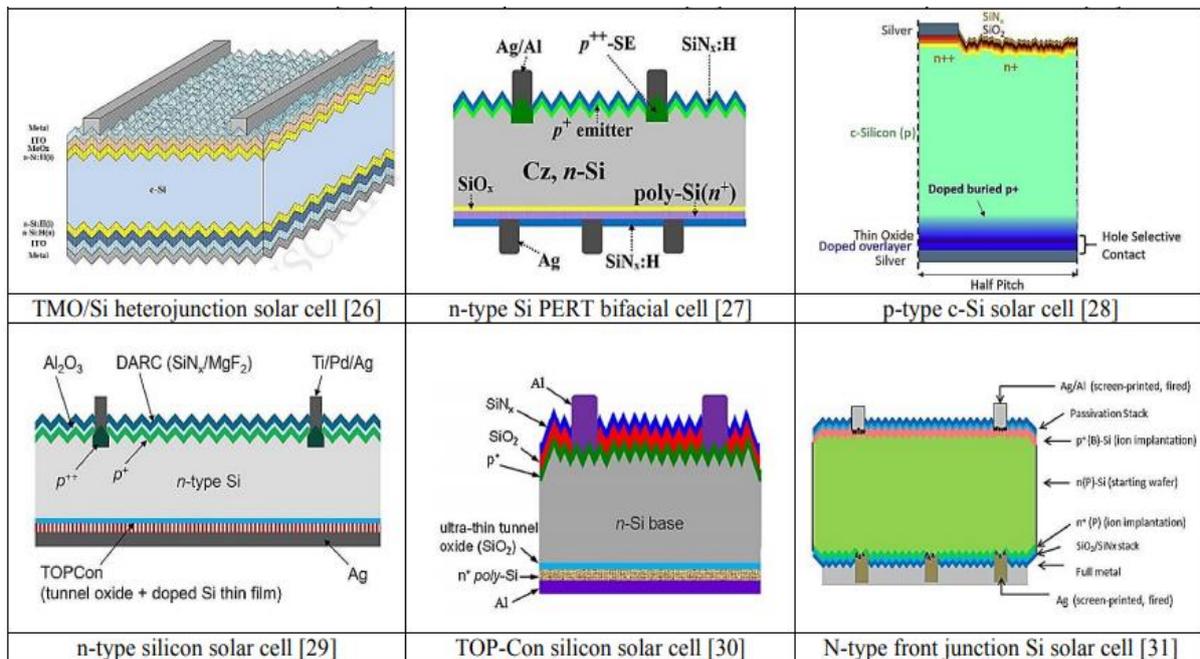
# Chapitre : 3 : Simulation des cellules solaires à base de CIGS par le SCAPS

## III- Structure de la cellule

L'étude menée par Park et al. [20] ont montré que le CIGSSe est plus performant que le CIGS en standard Revue des conditions d'irradiation, où la conversion d'énergie les rendements étaient de 8,81 et 8,28 % pour CIGSSe et CIGS, respectivement. Jheng et al. [21] ont trouvé une efficacité supérieure à 8,6% pour les systèmes construits avec des couches minces de CIGS. Fu et al. [22]. Les travaux menés par Liang et al. [23] a révélé que les films CIGS cultivés à 450 et 500°C composition stœchiométrique. Van Puyvelde et al. [24] suggéré d'utiliser des substrats polymères flexibles au lieu de rigides verre dans la fabrication de couches minces de Cu (In, Ga) Se<sub>2</sub> (CIGS) cellules solaires pour réduire le coût. D'autres travaux intéressants sur les dispositifs GICS peuvent être trouvés dans la littérature (Sobayel [25], Mallem et al. [26], Ding et al. [27], Procel et al. [28], Richter et al. [29], Tao et al. [30], Ok et al. [31], Rajani et al.[32], Singh et al. [33], et Jay et al. [34]). Ils ont également présenté dans le tableau 1.

<p>CIGS/WS<sub>2</sub> cell [20]</p>	<p>CIGS cell with LDS layer on top [21]</p>	<p>CIGS Cell with vs. effective layers [22]</p>
<p>Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/CIGS tandem cell [23]</p>	<p>Superstrate CIGS cell [24]</p>	<p>Completed CIGS cell [25]</p>
<p>p-CuBr/n-Si heterojunction cell [32]</p>	<p>n-type mc-Si screen-printed cell [33]</p>	<p>n-type a-Si:H/c-Si heterojunctions [34]</p>

## Chapitre : 3 : Simulation des cellules solaires à base de CIGS par le SCAPS

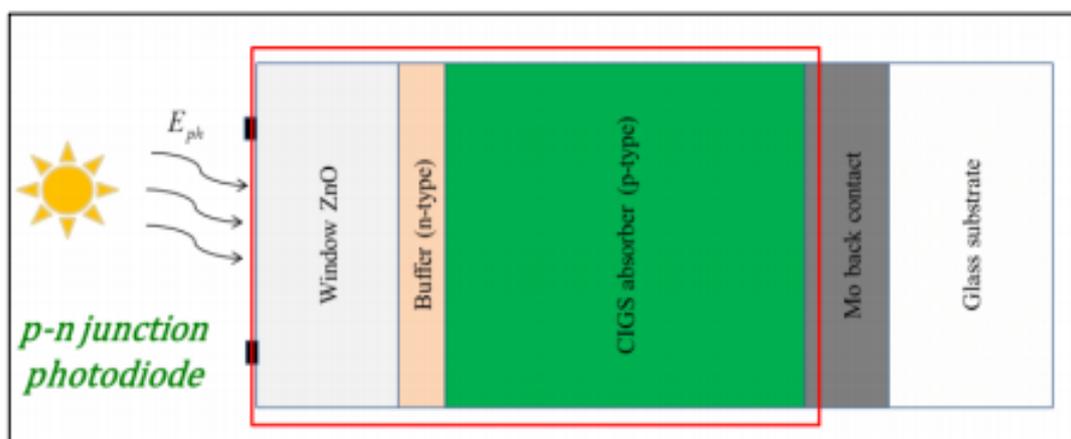


**Tableau 1.** Cellules PV avec structures matérielles vs. Solaire

La structure photovoltaïque à étudier est basée sur un absorbeur CIGS avec une couche tampon alternative comme le ZnO comme couche de fenêtre et un contact frontal en Molybdène (Mo) pris comme contact frontal. Cette configuration a été utilisée pour une cellule solaire CIGS.

### III-1- Cellule solaire à base de CIGS de SCAPS:

La structure de référence nous avons pris comme référence la structure développée par Gloeckler[1]. Le diagramme d'hétérostructure simplifié est illustré à la figure 2



**Figure 2:** Schéma d'une cellule solaire CIGS à couche mince

## **Chapitre : 3 : Simulation des cellules solaires à base de CIGS par le SCAPS**

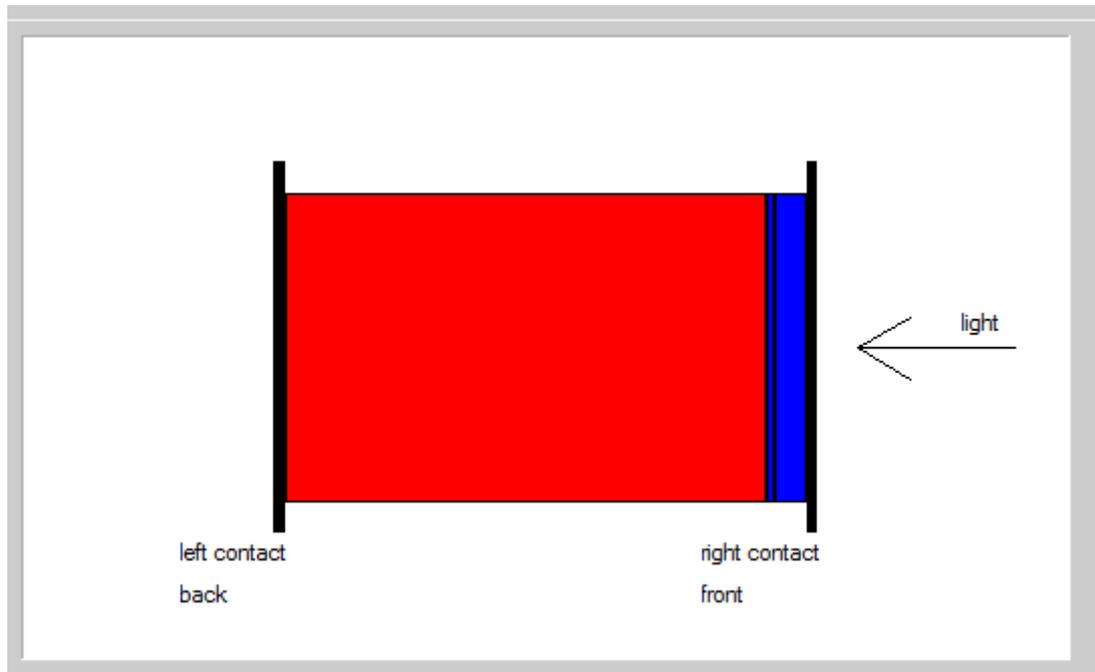
### **III-2- Paramètres physiques et optiques de la couche cellulaire avec CIGS:**

Les paramètres des matériaux ZnO, CdS et CIGS utilisés dans la simulation de la cellule solaire sont rapportés dans la littérature [1], présentés sur le tableau suivant:

<b>Physical and optical parameters</b>	<b>1st layer: CIGS</b>	<b>2nd layer: CdS</b>	<b>3rd layer: ZnO</b>
<b>Thickness (<math>\mu\text{m}</math>)</b>	<b>3.000</b>	<b>0.050</b>	<b>0.200</b>
<b>bandgap (eV)</b>	<b>1.100</b>	<b>2.400</b>	<b>3.300</b>
<b>electron affinity (eV)</b>	<b>4.500</b>	<b>4.200</b>	<b>4.450</b>
<b>dielectric permittivity (relative)</b>	<b>13.600</b>	<b>10.000</b>	<b>9.000</b>
<b>CB effective density of states (<math>1/\text{cm}^3</math>)</b>	<b>6.595E+17</b>	<b>2.500E+18</b>	<b>9.999E+16</b>
<b>VB effective density of states (<math>1/\text{cm}^3</math>)</b>	<b>1.855E+19</b>	<b>9.000E+18</b>	<b>9.950E+19</b>
<b>electron thermal velocity (cm/s)</b>	<b>1.000E+7</b>	<b>1.000E+7</b>	<b>1.000E+7</b>
<b>hole thermal velocity (cm/s)</b>	<b>1.000E+7</b>	<b>1.000E+7</b>	<b>1.000E+7</b>
<b>electron mobility (<math>\text{cm}^2/\text{Vs}</math>)</b>	<b>1.000E+2</b>	<b>1.000E+2</b>	<b>1.000E+2</b>
<b>hole mobility (<math>\text{cm}^2/\text{Vs}</math>)</b>	<b>2.500E+1</b>	<b>2.500E+1</b>	<b>2.500E+1</b>
<b>shallow uniform acceptor density ND (<math>1/\text{cm}^3</math>)</b>	<b>2.200E+18</b>	<b>2.200E+18</b>	<b>2.200E+18</b>
<b>shallow uniform acceptor density NA (<math>1/\text{cm}^3</math>)</b>	<b>1.800E+19</b>	<b>1.800E+19</b>	<b>1.800E+19</b>

**Tableau 2:** paramètre pour cellule solaire utilisant la simulation Scaps

### III-3- Simulation de cellules solaires basée sur le CIGS :



**Figure 3:** Cellule solaire basée sur le CIGS

On retrouve l'efficacité de 17,71%, on va donc jouer sur les paramètres de chaque couche pour augmenter le rendement de la manière suivante.

## **Chapitre : 3 : Simulation des cellules solaires à base de CIGS par le SCAPS**

---

### **Référence:**

- [1] M. Gloeckler, J. R. Sites, W.K. Metzger, “Grain-boundary recombination in Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> solar cells”, Journal of applied physics vol 98, no 11, p 113704, (2005).
- [2] Hadjab, M., Ibrir, M., Berrah, S., Abid, H., Saeed, M.A. (2018). Structural, electronic and optical properties for chalcopyrite semiconducting materials: ab-initio computational study. Optik,
- [3] Madhuri, K., Kannan, P.K., Chaudhari, S., Dhage, S.R., Dey, S.R. (2020). Effect of annealing time and heat flux on solvothermal synthesis of CIGS nanoparticles. Materials Today: Proceedings,
- [4] Mandati, S., Sarada, B.V. (2020). Electrodeposited chalcopyrite CuInGaSe<sub>2</sub> absorbers for solar energy harvesting. Materials Science for Energy Technologies,
- [5] Ramasamy, M., Jung, C.Y., Yeon, Y.B., Lee, C.W. (2017). Electrochemical Atomic Layer Deposition of CuIn (1-x) Ga<sub>x</sub>Se<sub>2</sub> on Mo Substrate. Journal of The Electrochemical Society,
- [6] Kotbi, A., Hartiti, B., Fadili, S., Labrim, H., Ridah, A., Thevenin, P. (2020). Synthesis and characterization of sprayed CIGS thin films for photovoltaic application. Materials Today: Proceedings,
- [7] Sheu, H.H., Hsu, Y.T., Jian, S.Y., Liang, S.C. (2016). The effect of Cu concentration in the semiconductor research for photovoltaic applications and transfer of solar cell production photovoltaic efficiency of CIGS solar cells prepared by co-evaporation technique. Vacuum
- [8] Jäger-Waldau, A. (2012). Progress in chalcopyrite compound. In Practical Handbook of Photovoltaics (pp.373-395). Academic Press.
- [9] Tai, K.F., Kamada, R., Yagioka, T., Kato, T., Sugimoto, H. (2017). From 20.9 to 22.3% Cu (In, Ga)(S, Se)<sub>2</sub> solar cell: reduced recombination rate at the heterojunction and the depletion region due to K-treatment. Japanese Journal of Applied Physics
- [10] Kovacic, M., Krc, J., Lipovsek, B., Chen, W.C., Edoff, M., Bolt, P. J., Topic, M. (2019). Light management design in ultra-thin chalcopyrite photovoltaic devices by employing optical modelling. Solar Energy Materials and Solar Cells,
- [11] Akhavan, V.A., Goodfellow, B.W., Panthani, M.G., Steinhagen, C., Harvey, T.B., Stolle, C.J., Korgel, B.A. (2012). Colloidal CIGS and CZTS nanocrystals: A precursor route to printed photovoltaics. Journal of Solid State Chemistry,
- [12] Pluengphon, P., Bovornratanaraks, T., Vannarat, S., Pinsook, U. (2012). The effects of Na on high pressure phases of CuIn<sub>0.5</sub>Ga<sub>0.5</sub>Se<sub>2</sub> from ab initio calculation. Journal of Physics: Condensed Matter,

### **Chapitre : 3 : Simulation des cellules solaires à base de CIGS par le SCAPS**

---

- [13] Lara-Lara, B., Fernández, A.M. (2019). Growth improved of CIGS thin films by applying mechanical perturbations to the working electrode during the electrodeposition process. *Superlattices and Microstructures*,
- [14] A. Niemegeers, M. Burgelman, K. Decock, J. Verchraegen, S. Degrave “ SCAPS3201 Manual”. ELIS, September (2013)
- [15] A. Niemegeers M. Burgelman, “Numerical modelling of ac-characteristics of CdTe and CIS solar cells”. In : *Photovoltaic Specialists Conference*, 1996., Conference Record of the TwentyFifth IEEE. IEEE. p. 901-904, (1996).
- [16] M. Burgelman, P. Nollet, S. Degrave, “Modelling polycrystalline semiconductor solar cells”. *Thin Solid Films*, vol. 361, p. 527-532, (2000).
- [17] A. Niemegeers, S. Gillis, M. Burgelman “ A user program for realistic simulation of polycrystalline heterojunction solar cells: SCAPS-1D.” In : *Proceedings of the 2nd World Conference on Photovoltaic Energy Conversion*, JRC, European Commission,.. p. 672-675, (1998).
- [18] A. Niemegeers, M. Burgelman “Effects of the Au/CdTe back contact on IV and CV characteristics of Au/CdTe/CdS/TCO solar cells”. *Journal of Applied Physics*, vol. 81, no 6, p. 2881-2886, (1997).
- [19] M. Burgelman, P. Nollet, S. Degrave “ Electronic behaviour of thin-film CdTe solar cells”. *Applied Physics A*, vol. 69, no 2, p. 149-153, (1999)
- [20] Park, S.J., Cho, Y., Moon, S.H., Kim, J.E., Lee, D.K., Gwak, J., Kim, J.Y., Kim, D.W., Min, B.K. (2014). A comparative study of solution-processed low- and high-band-gap chalcopyrite thin-film solar cells. *Journal of Physics D: Applied Physics*,
- [21] Jheng, B.T., Liu, P.T., Chang, Y.P., Wu, M.C. (2013). Polycrystalline Cu (In, Ga) Se<sub>2</sub> thin films and PV devices sputtered from a binary target without additional selenization. *ECS Transactions*,
- [22] Fu, Y.P., You, R.W., Lew, K.K. (2009). CuIn<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>Se<sub>2</sub> Absorber Layer Fabricated by Pulse-Reverse Electrodeposition Technique for Thin Films Solar Cell. *Journal of The Electrochemical Society*,
- [23] Sharbati, S., Gharibshahian, I., Orouji, A.A. (2019). Designing of Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/CIGS tandem solar cell by analytical model. *Solar Energy*,
- [24] Bouchama, I., Boudour, S., Bouarissa, N., Rouabah, Z. (2017). Quantum and conversion efficiencies optimization of superstrate CIGS thin-film solar cells using In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> buffer layer. *Optical Materials*

### **Chapitre : 3 : Simulation des cellules solaires à base de CIGS par le SCAPS**

---

- [25] Saifullah, M., Moon, J.H., Ahn, S., Gwak, J., Ahn, S., Kim, K., Eo, Y.J., Yun, J.H. (2016). Effect of Cu content on the photovoltaic properties of wide bandgap CIGS thin-film solar cells prepared by single-stage process. *Current Applied Physics*,
- [26] Mallem, K., Kim, Y.J., Hussain, S.Q., Dutta, S., Le, A.H.T., Ju, M., Park, J., Cho, Y.H., Kim, Y., Cho, E.C., Yi, J. (2019). Molybdenum oxide: A superior hole extraction layer for replacing p-type hydrogenated amorphous silicon with high efficiency heterojunction Si solar cells. *Materials Research Bulletin*,
- [27] Ding, D., Lu, G., Li, Z., Zhang, Y., Shen, W. (2019). High-efficiency n-type silicon PERT bifacial solar cells with selective emitters and poly-Si based passivating contacts. *Solar Energy*,
- [28] Procel, P., Löper, P., Crupi, F., Ballif, C., Ingenito, A. (2019). Numerical simulations of hole carrier selective contacts in p-type c-Si solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*,
- [29] Richter, A., Benick, J., Feldmann, F., Fell, A., Hermle, M., Glunz, S.W. (2017). n-Type Si solar cells with passivating electron contact: Identifying sources for efficiency limitations by wafer thickness and resistivity variation. *Solar Energy Materials and Solar Cells*,
- [30] Tao, K., Li, Q., Hou, C., Jiang, S., Wang, J., Jia, R., Sun, Y., Li, Y.T., Jin, Z., Liu, X. (2017). Application of a-Si/ $\mu$ c-Si hybrid layer in tunnel oxide passivated contact n-type silicon solar cells. *Solar Energy*,
- [31] Ok, Y.W., Upadhyaya, A.D., Tao, Y., Zimbardi, F., Ryu, K., Kang, M.H., Rohatgi, A. (2014). Ion-implanted and screen-printed large area 20% efficient N-type front junction Si solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*,
- [32] Rajani, K.V., Daniels, S., Rahman, M., Cowley, A., McNally, P.J. (2013). Deposition of earth-abundant p-type CuBr films with high hole conductivity and realization of p-CuBr/n-Si heterojunction solar cell. *Materials Letters*,
- [33] Singh, S., Dross, F., Posthuma, N.E., Mertens, R. (2011). Large area 15.8% n-type mc-Si screen-printed solar cell with screen printed Al-alloyed emitter. *Solar Energy Materials and Solar Cells*,
- [34] Jay, F., Muñoz, D., Desrués, T., Pihan, E., De Oliveira, V.A., Enjalbert, N., Jouini, A. (2014). Advanced process for n-type mono-like silicon a-Si: H/c-Si heterojunction solar cells with 21.5% efficiency. *Solar Energy Materials and Solar Cells*,
- [35] Gloeckler, M., Sites, J.R., Metzger, W.K. (2005). Grain-boundary recombination in Cu (In, Ga) Se<sub>2</sub> solar cells. *Journal of Applied Physics*,

### I- Introduction

Les performances des cellules solaires sont directement liées aux nombreux paramètres tels que : l'absorption du matériau de la lumière, le transport de charge, la longueur de diffusion des porteurs de charge, les états d'interfaces, etc. Une cellule solaire est composée par des couches actives constituées par des matériaux semi-conducteurs ainsi que deux électrodes métalliques. Afin d'atteindre un rendement de conversion élevé d'une cellule solaire les matériaux constituant les couches et les électrodes métalliques doivent être bien choisis tel que l'utilisation d'un absorbeur ayant un coefficient d'absorption optique élevé. Le rendement de la cellule dépend en outre de la qualité de diverses couches, autrement dit des divers procédés de croissance.

### II- Résultats et discussion

Nous tenterons d'améliorer le rendement obtenu de 17,71% en optimisant les deux paramètres électriques (dopage) et technologiques (épaisseur) des trois couches (ZnO, CdS, CIGS), Dans cet article nous nous intéressons et nous présentons à étudier l'effet de épaisseurs de couches sur les paramètres physiques et optiques de la cellule solaire à base de CIGS.

#### \* Paramètres physiques et optiques de la 1ère couche: CIGS Modifier

Épaisseur: 3,00 → 3,9 μm

#### \* Paramètres physiques et optiques de la 2ème couche: CdS Modifier

Épaisseur: 0,050 → 0,020μm

#### \* Paramètres physiques et optiques de la 3ème couche: ZnO Modifier

Épaisseur: 0,20 → 0,043μm

#### II-1- La cellule solaire basée sur le CIGS de SCAPS Modifier

Ainsi, la nouvelle cellule devient:

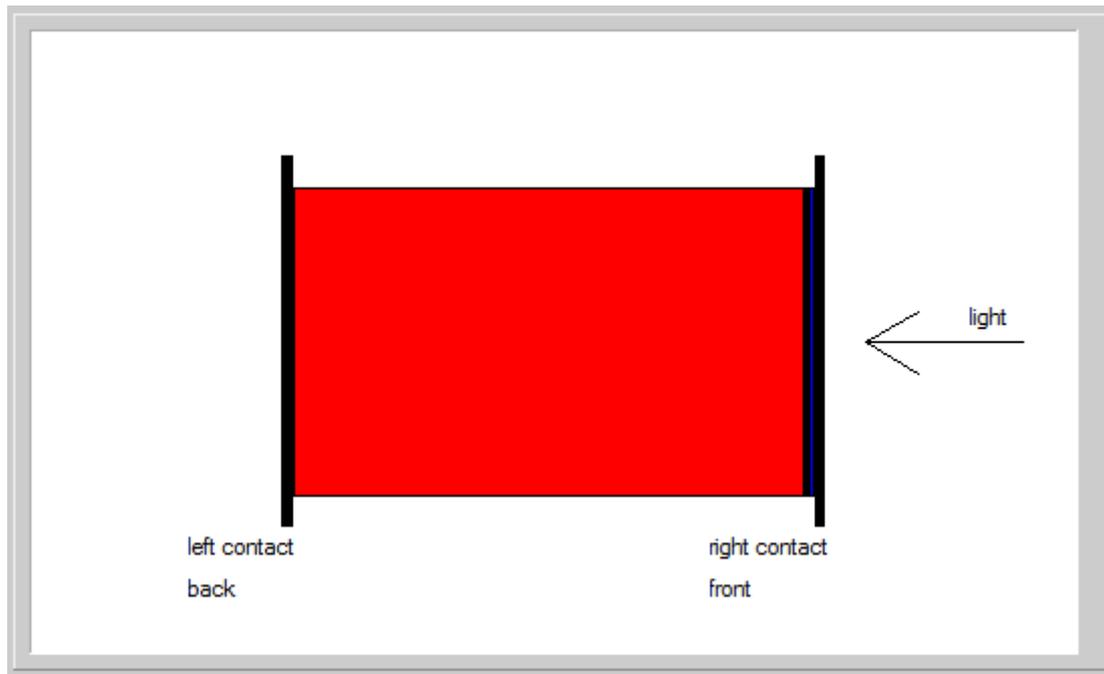


Figure 1: Cellule solaire basée sur le CIGS Modifier

## II-2- Simulation de cellules solaires basée sur le CIGS

Les paramètres photovoltaïques de la cellule inférieure CIGS sont donnés dans le tableau suivant avec d'autres résultats de simulation de référence [1] pour la comparaison avec nos résultats de simulation en utilisant le simulateur SCAPS.

<i>Solar cell parameters</i>	<b>Simulation results [1]</b>	<b>Simulation results of our work</b>
<b>Open circuit voltage Voc (Volt)</b>	0.643931	<b>0.7928</b>
<b>Short-circuit current Jsc (mA/cm2)</b>	33.72031927	<b>35.200983</b>
<b>Filling factor FF (%)</b>	81.5744	<b>83.86</b>
<b>Efficiency <math>\eta</math> (%)</b>	17.7127	<b>23.40</b>

Tableau 1: Paramètres des cellules solaires déduits de la courbe IV calculée

### II-2-1- Effet des différentes épaisseurs de CIGS:

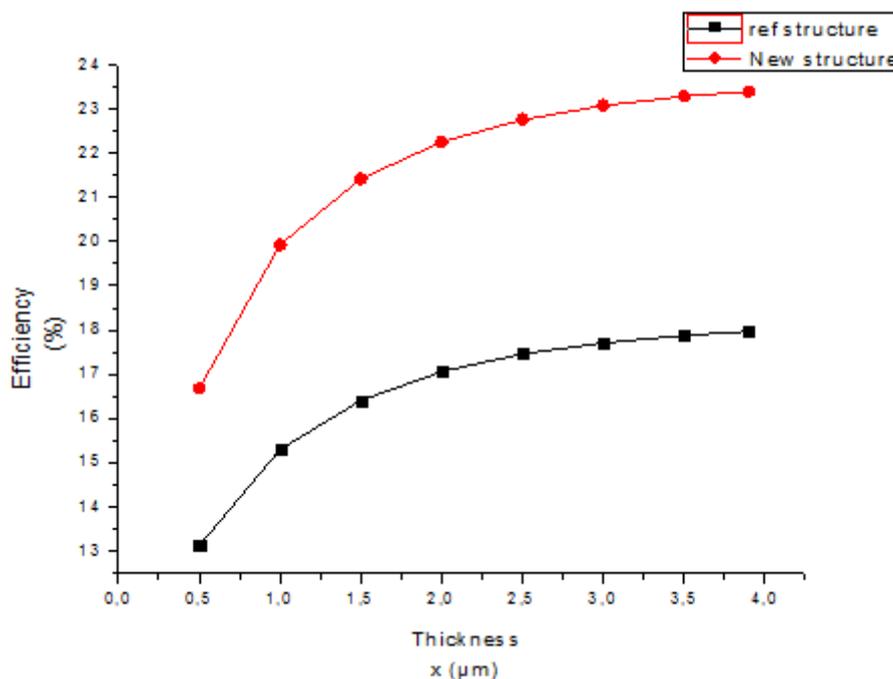
#### • Effet de la couche absorbante CIGS:

L'absorbeur est la partie de la cellule dans laquelle les photons seront convertis en paires électron-trou. Dans ce cas, il s'agit d'un semi-conducteur de type P de la famille I-II-VI, dont les différentes variantes ont déjà été étudiées conduisent à la formule générale suivante:  $(\text{Cu, Ag}) (\text{In, Ga, Al}) (\text{Se, S, Te})_2$ .

La substitution du Cu par l'argent, de l'indium par le gallium ou l'aluminium, le sélénium par le soufre ou le tellure, permet de modifier les propriétés du matériau telles que sa bande passante interdite. Le composé le plus développé dans la recherche et l'industrie est le  $\text{Cu} (\text{In, Ga}) \text{Se}_2$ .

#### II-2-1-1- Etude de la variation de l'Efficacité en fonction de l'épaisseur de la couche CIGS

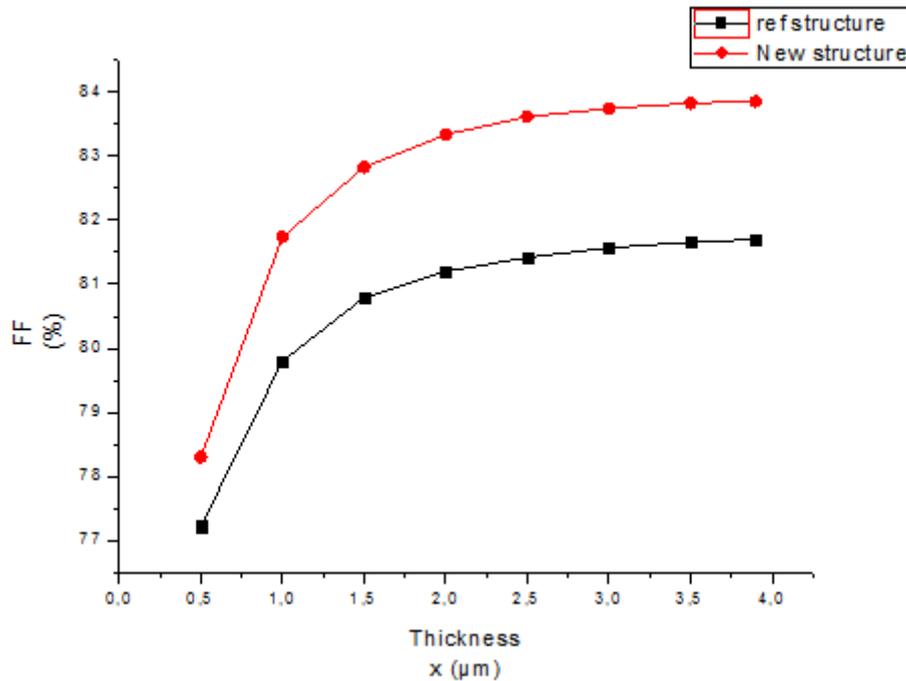
La figure montre que l'efficacité augmente lorsque l'épaisseur de la couche absorbante CIGS augmente.



**Figure 2:** Variation de l'efficacité en fonction de l'épaisseur de la couche CIGS

### II-2-1-2- Etude de la variation du facteur de remplissage en fonction de l'épaisseur de la couche CIGS

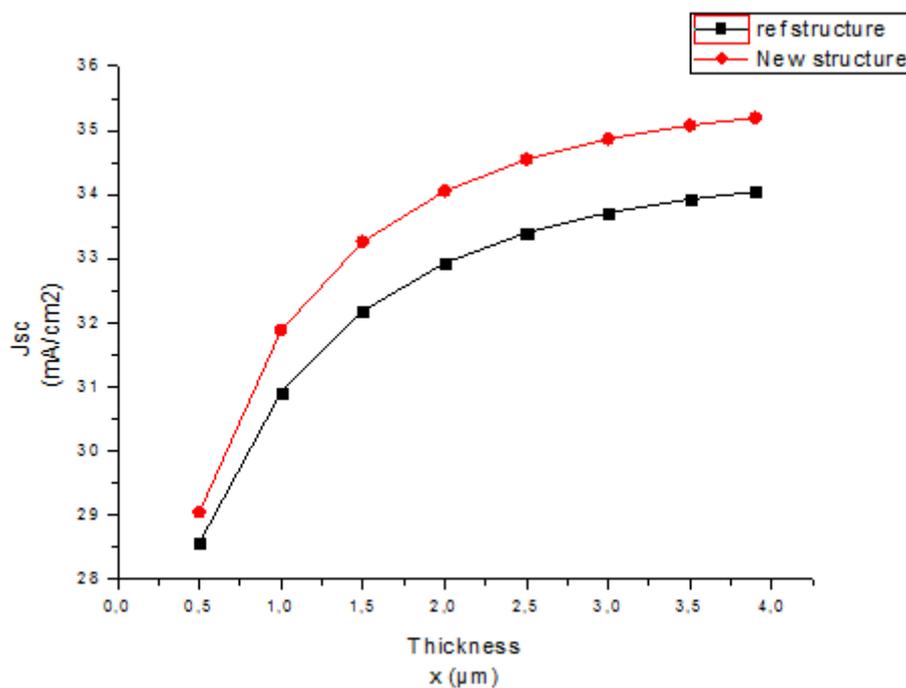
La figure montre que le facteur de remplissage augmente lorsque l'épaisseur de la couche absorbante CIGS augmente.



**Figure 3:** Variation du facteur de remplissage en fonction de l'épaisseur de la couche CIGS

### II-2-1-3- Etude de la variation du courant de court-circuit en fonction de l'épaisseur de la couche CIGS

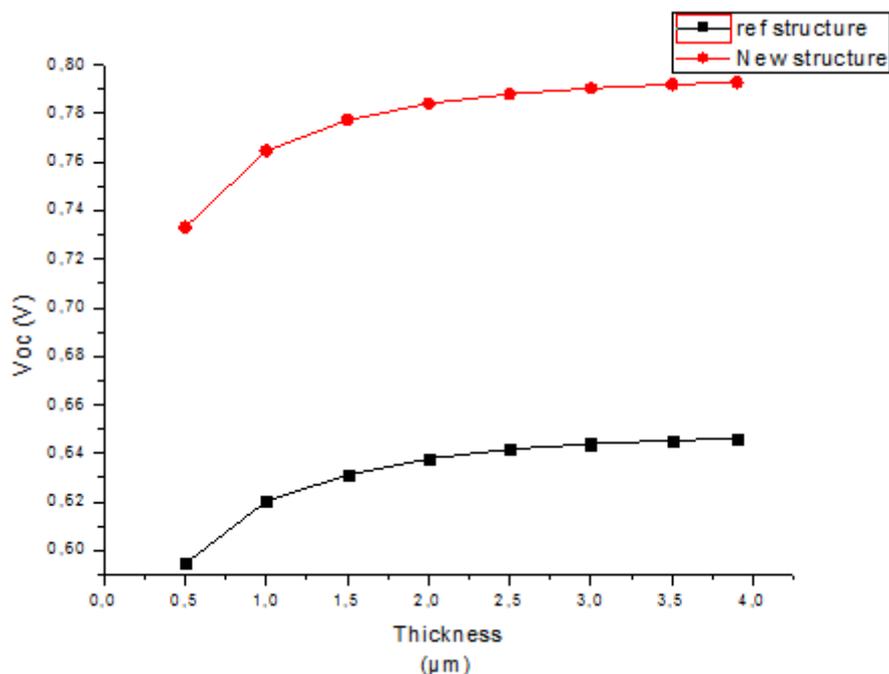
La figure montre que le courant de court-circuit augmente lorsque l'épaisseur de la couche absorbante CIGS augmente.



**Figure 4:** Variation du courant de court-circuit en fonction de l'épaisseur de la couche CIGS

#### II-2-1-4- Etude de la variation de la tension en circuit ouvert en fonction de l'épaisseur de la couche CIGS

La figure montre que la tension en circuit ouvert augmente lorsque l'épaisseur de la couche absorbante CIGS augmente.



**Figure 5:** Variation de la tension en circuit ouvert en fonction de l'épaisseur de la couche CIGS

### II-2-2- Effet des différentes épaisseurs de CdS:

#### • Effet de la couche tampon CdS:

La couche tampon à base de CdS est constituée d'un semi-conducteur de type N dont la bande interdite  $E_g$  est très large par rapport à celle de l'absorbeur CIGS.

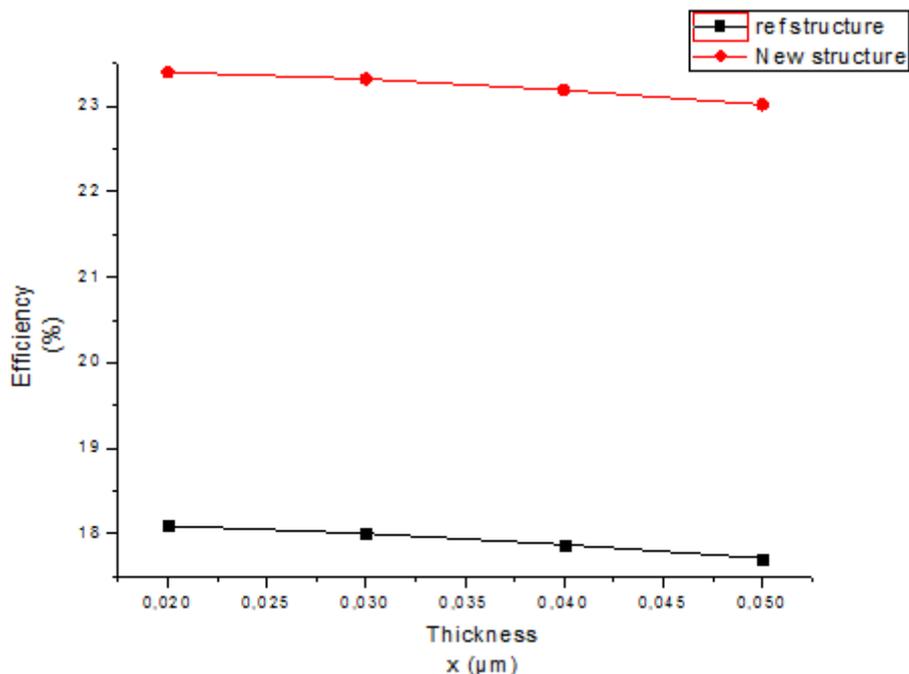
Cette couche adapte la largeur de la bande interdite entre l'absorbeur et la couche de fenêtre et limite les recombinaisons de porteurs à l'interface de ces deux couches, elle permet également de protéger la surface de l'absorbeur lors du dépôt par pulvérisation cathodique de la couche de ZnO, ce qui peut provoquer des défauts à la surface du CIGS. Cependant, le CdS reste préféré car il donne toujours des rendements élevés.

Cependant, sa bande passante interdite, égale à relativement faible, génère des pertes optiques, de sorte que des quantités importantes de lumière sont absorbées avant de pouvoir atteindre la couche CIGS, même pour des couches CdS aussi fines que.

Les photons absorbés dans le CdS ne contribuent pas au photocourant, en raison de la courte longueur de diffusion des porteurs minoritaires (trous) dans le CdS, ce qui conduit à un taux de recombinaison élevé. Pour cette raison, et en plus des contraintes liées à l'utilisation du Cadmium (Cd) qui est un élément toxique, de nombreuses études sont menées pour remplacer le CdS par d'autres matériaux, parmi lesquels on peut citer (OH, S), Zn (O, OH), ZnS.

### II-2-2-1- Etude de la variation de l'Efficacité en fonction de l'épaisseur de la couche CdS

La figure montre que l'efficacité diminue avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche de CdS.



**Figure 6:** Variation de l'efficacité en fonction de l'épaisseur de la couche de CdS

### II-2-2-2- Etude de la variation du facteur de remplissage en fonction de l'épaisseur de la couche CdS

La figure montre que le facteur de remplissage est presque constant avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche de CdS.

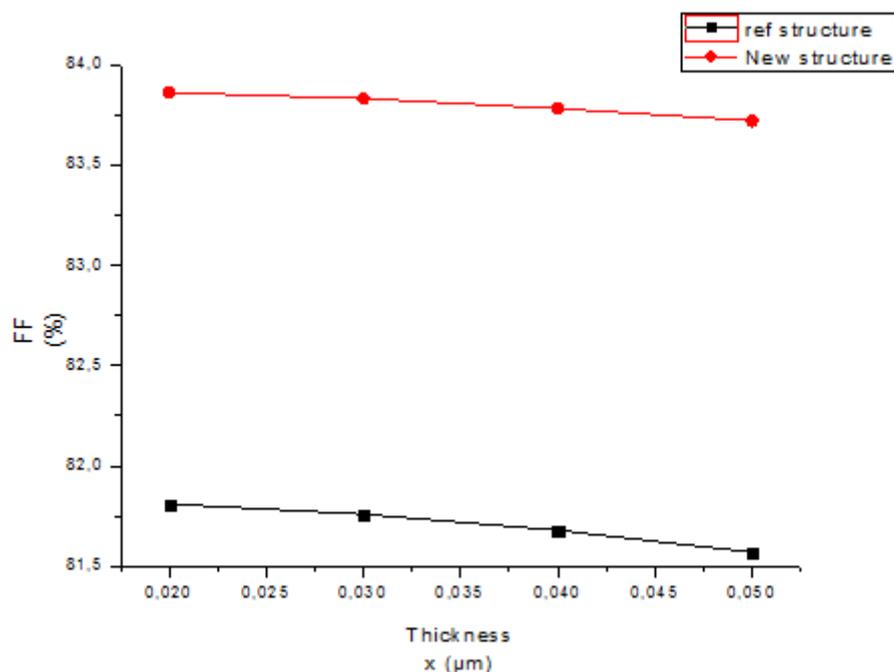


Figure 7: Variation du facteur de remplissage en fonction de l'épaisseur de la couche CdS

### II-2-2-3- Etude de la variation du courant de court-circuit en fonction de l'épaisseur de la couche CdS

La figure montre que le courant de court-circuit diminue avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche de CdS.

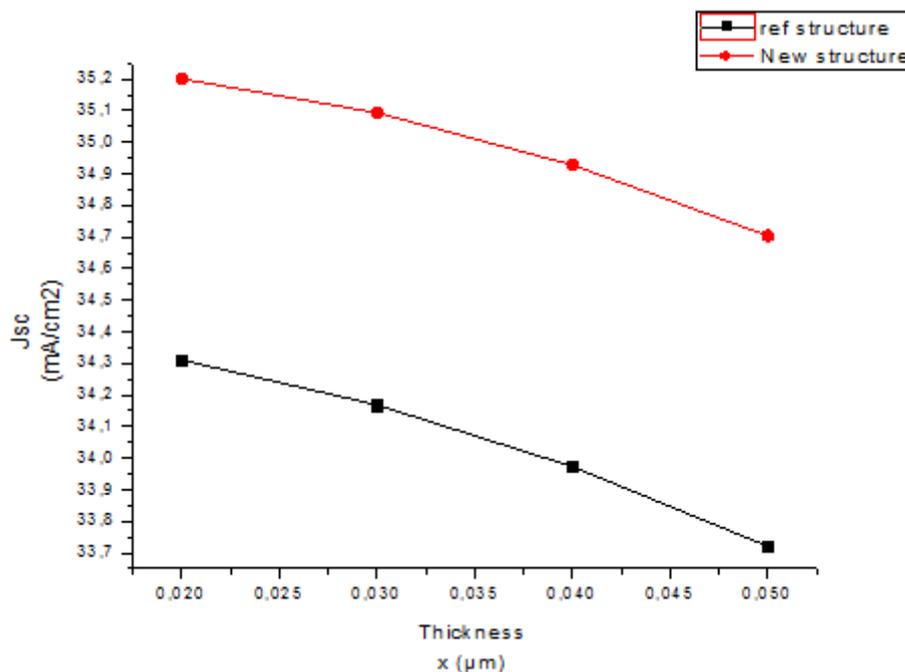
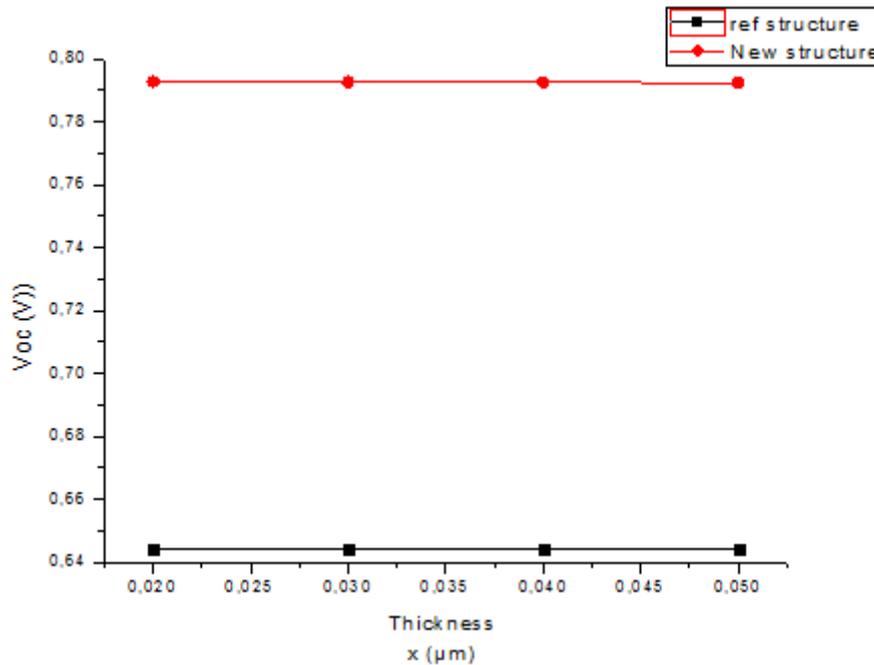


Figure 8: Variation du courant de court-circuit en fonction de l'épaisseur de la couche CdS

### II-2-2-4- Etude de la variation de la tension en circuit ouvert en fonction de l'épaisseur de la couche CdS

La figure montre que la tension en circuit ouvert est presque constante avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche de CdS .



**Figure 9:** Variation du courant de court-circuit en fonction de l'épaisseur de la couche CdS

### II-2-3- Effet des différentes épaisseurs de ZnO:

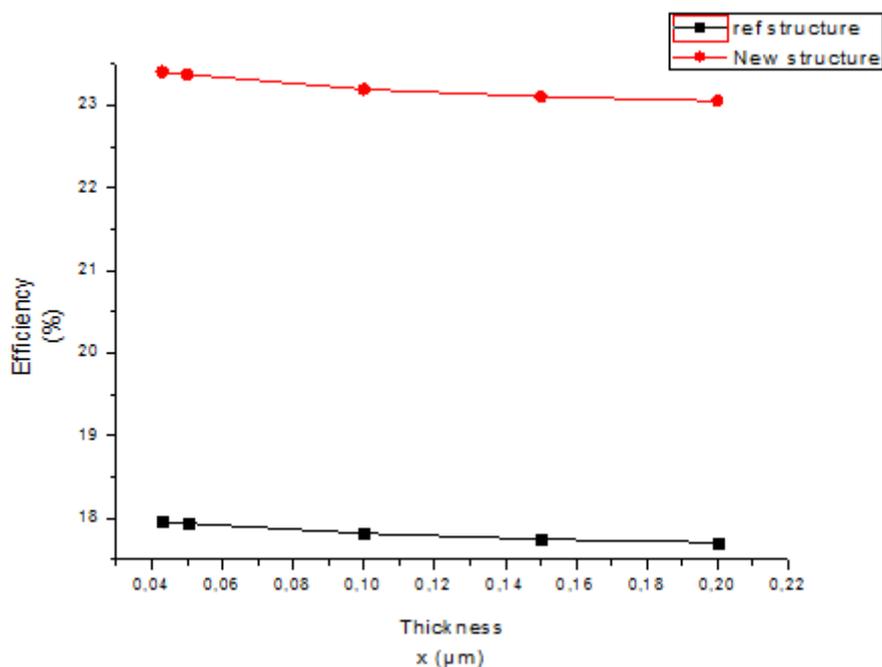
#### • Effet de la couche de fenêtre ZnO:

L'une des deux électrodes est transparente pour permettre la transmission de la lumière suffisamment au niveau de la zone de jonction P-N et vers la couche absorbante et conductrice CIGS pour transporter le photocourant généré par la cellule solaire vers le circuit externe.

Cette électrode est une fine couche d'oxyde conducteur transparent (TCO), une fine grille métallique doublée (Ni-Al) est déposée sur la couche de fenêtre de manière à réduire sa résistance série et collecter les charges générées par le dispositif. Ni agit comme une couche de liaison et permet d'éviter l'oxydation de l'Al liée à la présence sous-jacente de TCO. TCO, généralement utilisé pour les cellules CIGS, et oxyde de zinc (ZnO) déposé par pulvérisation.

### II-2-3-1- Etude de la variation de l'Efficacité en fonction de l'épaisseur de la couche de ZnO

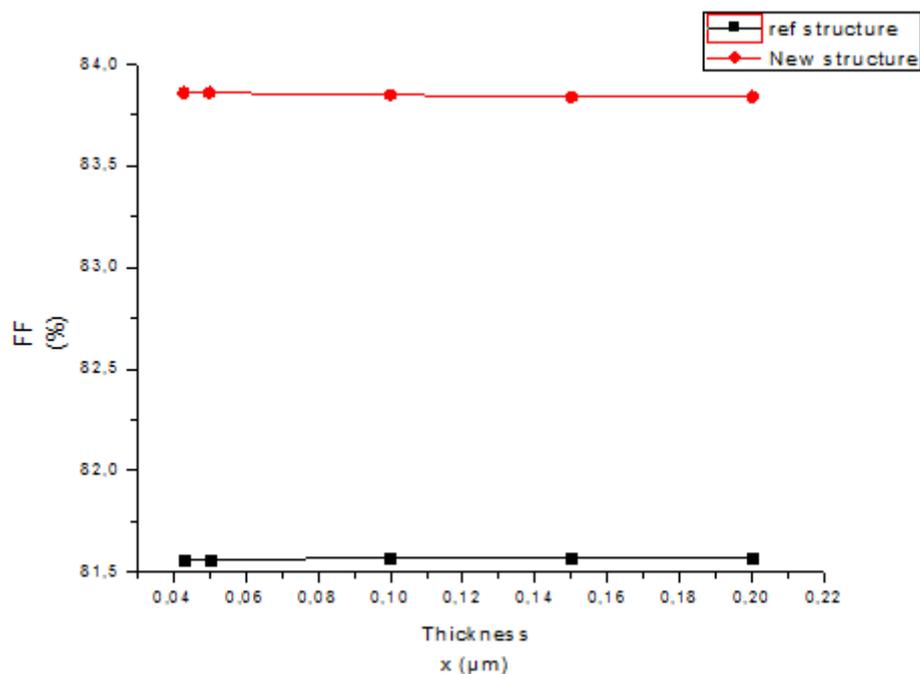
La figure montre que l'efficacité diminue avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche de ZnO.



**Figure 10:** Variation de l'efficacité en fonction de l'épaisseur de la couche de ZnO

### II-2-3-2- Etude de la variation du facteur de remplissage en fonction de l'épaisseur de la couche de ZnO

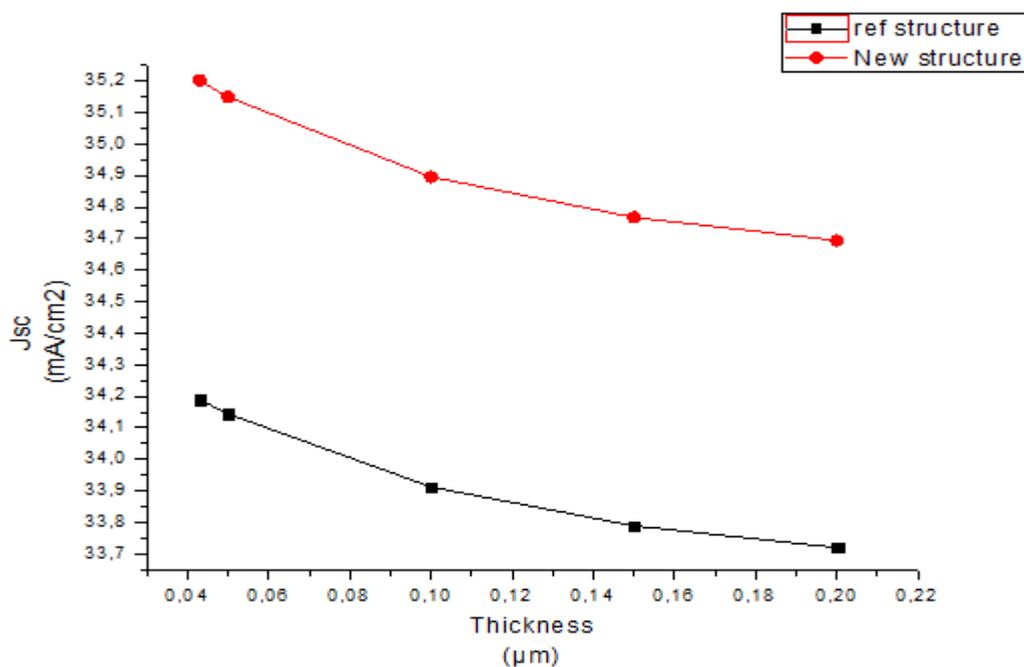
La figure montre que le facteur de remplissage est presque constant avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche de ZnO.



**Figure 11:** Variation du facteur de remplissage en fonction de l'épaisseur de la couche de ZnO

### II-2-3-3- Etude de la variation du courant de court-circuit en fonction de l'épaisseur de la couche de ZnO

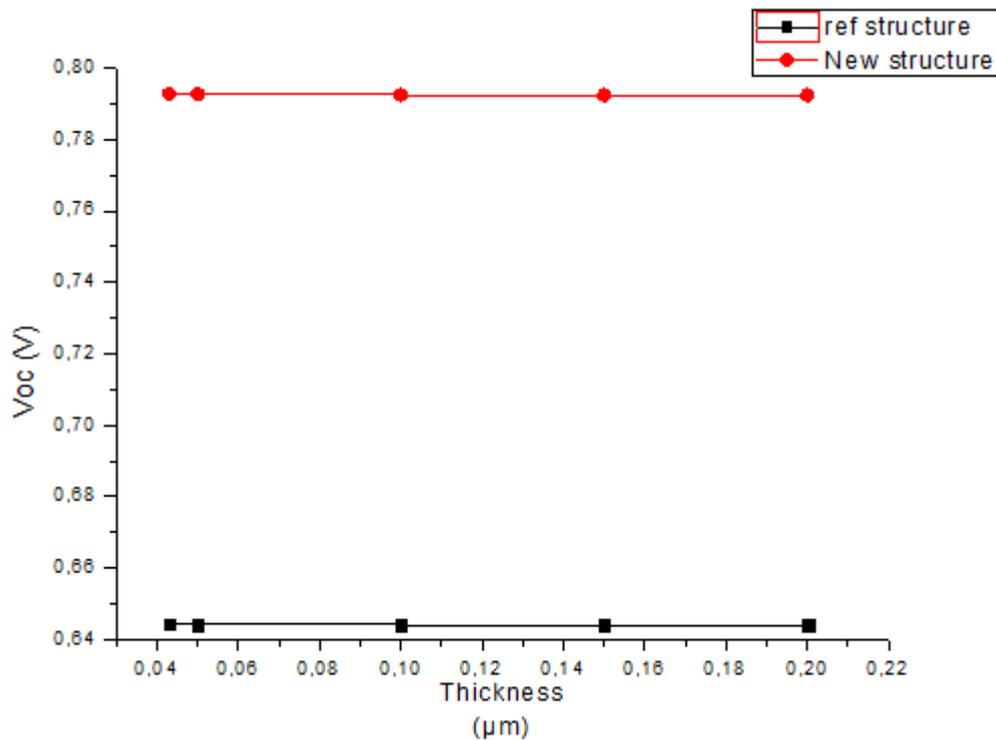
La figure montre que le courant de court-circuit diminue avec l'augmentation de l'épaisseur du ZnO couche.



**Figure 12:** Variation du courant de court-circuit en fonction de l'épaisseur de la couche de ZnO

### II-2-3-4- Etude de la variation de la tension en circuit ouvert en fonction de l'épaisseur de la couche de ZnO

La figure montre que la tension en circuit ouvert est presque constante avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche de ZnO



**Figure 13:** Variation de la tension en circuit ouvert en fonction de l'épaisseur de la couche de ZnO

### Conclusion

Dans cette étude, nous présentons les résultats de la simulation numérique par SCAPS d'une cellule solaire CIGS. Au départ, nous choisissons un modèle de structure en fonction de la littérature pour calibrer notre logiciel et établir un code de calcul spécifique aux structures étudiées. Ensuite, nous étudierons l'effet de l'épaisseur des trois couches ZnO, CdS et CIGS sur le rendement de conversion photovoltaïque ( $\eta$ ), le facteur de remplissage (FF); courant de court-circuit ( $J_{sc}$ ) et tension de circuit ouvert ( $V_{oc}$ ). Le rendement de la cellule du 1er cas est de: 17,71% et le rendement de la cellule de modification devient: 23,40%, On note que l'épaisseur a un impact très important sur l'amélioration du rendement de la cellule solaire. Il est nécessaire de diminuer l'épaisseur de la couche de fenêtre ZnO et de la couche tampon CdS afin d'augmenter l'épaisseur de l'absorbeur CIGS à 3,9  $\mu\text{m}$  pour avoir de bonnes performances.

## Conclusion générale

---

En raison de l'épuisement des énergies fossile et de la pollution qui en découle, la filière photovoltaïque a pris, ces dernières années, une ampleur considérable et son développement est devenu une nécessité pour toute l'humanité.

Hormis les cellules solaires classiques à base de silicium, une nouvelle technologie a vu le jour, dites «couches minces ». Elle repose sur l'utilisation de matériaux avec une épaisseur de l'ordre de quelques microns qui est suffisante pour la conversion photovoltaïque étant données que leurs coefficients d'absorption des photons est très supérieurs à celui du silicium cristallin.

Ces matériaux sont donc déposés en couche très mince sur un substrat (verre, céramique, polymères). Le coût de fabrication de ce type de cellule est faible par rapport aux cellules classiques.

La réduction du coût de fabrication grâce à une réduction de matières premières et à une méthode d'intégration totale sont deux points aujourd'hui à fort potentiel de développement. Contrairement aux filières de silicium cristallin, ces technologies ne nécessitent ni découpe ni post-assemblage de cellules pour aboutir à un module commercial réduisant les coûts de fabrication.

Dans ce travail nous avons effectué une simulation des cellules solaires simple jonction en couches minces à base de CGS et CIGS, nous avons utilisé le logiciel SCAPS pour simuler les caractéristiques électriques de ces cellules solaires.

Dans le premier chapitre, nous avons donné des Généralités sur les matériaux Chalcopyrites constitues les notions fondamentales des matériaux semiconducteurs tels que le Sélénure de Cuivre Indium et Gallium (CIGS), le sulfure de cadmium (CdS) et l'oxyde de zinc (ZnO) constituant nos cellules solaires à étudier, les propriétés électriques et optiques,

## Conclusion générale

---

nous avons ensuite expliqué le fonctionnement des cellules photovoltaïques et leurs caractéristiques principales.

Le deuxième chapitre introduit des généralités concernant les cellules solaires en général et la cellule solaire simple à base de (CIGS) et (CGS) en particulier, nous avons également, décrit les propriétés électriques et optiques du matériau utilisé dans ce travail ainsi que les propriétés constituant la cellule solaire.

Le troisième chapitre présente la simulation des cellules solaires à base de CIGS par le SCAPS, nous choisissons un modèle de structure en fonction de la littérature pour calibrer notre logiciel et établir un code de calcul spécifique aux structures étudiées, après nous étudierons l'effet de l'épaisseur des trois couches ZnO, CdS et CIGS sur le rendement de conversion photovoltaïque ( $\eta$ ), le facteur de remplissage (FF); courant de court-circuit ( $J_{sc}$ ) et tension de circuit ouvert ( $V_{oc}$ ).

Le rendement de la cellule du 1er cas est de: 17,71% et le rendement de la cellule de modification devient: 23,40%, On note que l'épaisseur a un impact très important sur l'amélioration du rendement de la cellule solaire. Il est nécessaire de diminuer l'épaisseur de la couche de fenêtre ZnO et de la couche tampon CdS afin d'augmenter l'épaisseur de l'absorbeur CIGS à 3,9  $\mu\text{m}$  pour avoir de bonnes performances.

On peut résumer les résultats de l'étude de simulation comme suite: L'augmentation de l'épaisseur de la couche en ZnO diminue le rendement de conversion de la cellule  $\eta$  ; L'augmentation de l'épaisseur de la couche de type n en CdS diminue aussi le rendement de la cellule solaire ; L'augmentation de l'épaisseur de la couche absorbant de type p en CIGS entraîne une augmentation dans le rendement  $\eta$  et le facteur de forme FF avec des petites valeurs, où la tension de circuit ouvert  $V_{co}$  presque constant. L'augmentation du dopage de la couche en ZnO due à la croissance du rendement et le facteur de forme FF.

## Conclusion générale

---

Comme perspective Plusieurs pistes existent pour poursuivre le travail sur la recherche présentée dans cette thèse.

- Nous allons par la suite étudier les propriétés optiques pour la même structure de la cellule solaire en optimisant le rendement quantique. Car ce type de cellule solaire est caractérisé par un rendement quantique élevé.
- Nous simulerons et optimiserons une structure à base de CIGS bicouches en utilisant un simulateur dimensionnel SCAPS-1D.



## Effect of the Properties of Chalcopyrite Semiconductors on the Physical and Optical Parameters of Cell Layers with CIGS

Merwan Rachedi<sup>1</sup>, Abdelkrim Merad<sup>2</sup>, Giulio Lorenzini<sup>3\*</sup>, Hijaz Ahmad<sup>4</sup>, Younes Menni<sup>1</sup>, Houari Ameur<sup>5</sup>, Ibtissem Sifi<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Unit of Research on Materials and Renewable Energies, Department of Physics, Faculty of Sciences, Abou Bekr Belkaid University, P.O. Box 119, Tlemcen 13000, Algeria

<sup>2</sup> Solid State Physics Team, Theoretical Physics Laboratory, Faculty of Sciences, University of Tlemcen, B.P. 119, Tlemcen 13000, Algeria

<sup>3</sup> Department of Engineering and Architecture, University of Parma, Parco Area delle Scienze, 181/A, Parma 43124, Italy

<sup>4</sup> Department of Basic Science, University of Engineering and Technology, Peshawar 25000, Pakistan

<sup>5</sup> Department of Technology, University Centre of Naama, P.O. Box 66, Naama 45000, Algeria

Corresponding Author Email: [Giulio.lorenzini@unipr.it](mailto:Giulio.lorenzini@unipr.it)

<https://doi.org/10.18280/rcma.310201>

### ABSTRACT

**Received:** 7 January 2021

**Accepted:** 15 April 2021

#### Keywords:

*solar materials, CuInGaSe<sub>2</sub> solar cells, cell layers with CIGS, chalcopyrite semiconductors, conversion efficiency*

In this paper, the impact of various buffers of applying components on the effectiveness of CuInGaSe<sub>2</sub> solar cells is studied numerically. The SCAPS software is employed to achieve the investigation. The main parameters of the inspected devices are: the photovoltaic conversion effectiveness ( $\eta$ ), the filling factor (FF), short-circuit current (Jsc), and open circuit voltage (Voc). These photovoltaic parameters are analyzed vs. the thickness in the various buffer layers under study. The numerical findings revealed that the most significant conversion effectiveness (23.4%) of the CIGS solar cell is obtained with the CdS buffer layer. An attempt is conducted to improve this efficiency by using the SCAPS and by optimizing the two electrical and technological parameters of the three layers (ZnO, CdS, CIGS).

## 1. INTRODUCTION

The natural chalcopyrite is characterized by an electronic structure similar to the *n*-type semiconductor. This is why it is not expected to achieve considerable current at low anodic potentials until a 'breakdown' potential is reached. This characteristic is highly encountered in electrochemistry, where low currents are given at a potential up to 1.0 V. Trends in capacitance, limiting currents, and photocurrents are also the characteristics of the chalcopyrite [1].

Hadjab et al. [2] examined the electronic and structural characteristics of chalcopyrite semiconducting material Copper-Indium-Gallium-Selenium. They reported that the investigated material is very suitable in photovoltaic and optoelectronic systems [2]. Madhuri et al. [3] indicated that CuIn<sub>x</sub>Ga(1-x)Se<sub>2</sub> (CIGS) is a renowned absorbing material that may be highly efficient in solar cells. Its efficiency of 22.6% is considered as very competitive to Si based solar cells. CIGS nanoparticles are known by their significant surface to volume ratio and may be used in photovoltaic systems at low temperature. Mandati and Sarada [4] used the pulsed current electrochemical deposition to fabricate CIGS films. Ramasamy et al. [5] illustrated in their work that the chalcopyrite CuIn(1-x)Ga<sub>x</sub>Se<sub>2</sub> (CIGS) thin films are photoelectrochemically active with p-type conductivity.

Kotbi et al. [6] confirmed that the CuInGaS<sub>2</sub> (CIGS) thin films have a chalcopyrite structure. Their analysis showed that the rise of the gallium proportion yields an increase in the

optical band gap energy of the films within the range [1.50-1.56] eV and an augmentation in the electrical properties in the sheet resistivity. Sheu et al. [7] determined the electrical and structural characteristics of polycrystalline CIGS thin films by varying the Cu/(In+Ga) ratio with the help of a co-evaporation technique.

The family of chalcopyrites are well known by their significant performance for solar cells, as reported by Jäger-Waldau [8]. The chalcopyrites allow stimulated emission/laser action, since they show direct bandgaps and narrow luminescent bands. Tai et al. [9] obtained considerable performance of 22.3% with Cu(In, Ga)(Se, S)<sub>2</sub> solar cells. Generally, CIGS PV layers are fabricated under considerable temperatures (> 450°C) [10]. Akhavan et al. [11] employed CIGS nanocrystals and their technique allowed 3.1% power conversion efficiency.

The structure of CIGS is chalcopyrite at ambient pressure. Pluengphon et al. [12] proposed the high-pressure phase transitions similar to those of the CuInSe<sub>2</sub> phase transitions. Lara-Lara and Fernández [13] reported that the performance of the semiconductor Cu(In, Ga)Se<sub>2</sub> (CIGS) in photovoltaic systems exceeds 20% by the physical vapor deposition. They reported also that there are various approaches to make the CIGS absorber layer, and the electro deposition technique is the most suitable for many economic and technical aspects. technique to make it for different technical and reasons.

The study conducted by Park et al. [14] showed that the CIGS<sub>Se</sub> is more efficient than the CIGS under standard

irradiation conditions, where the energy conversion efficiencies were 8.81 and 8.28% for CIGSse and CIGS, respectively. Jheng et al. [15] found an efficiency higher than 8.6% for the systems constructed with thin films of CIGS.

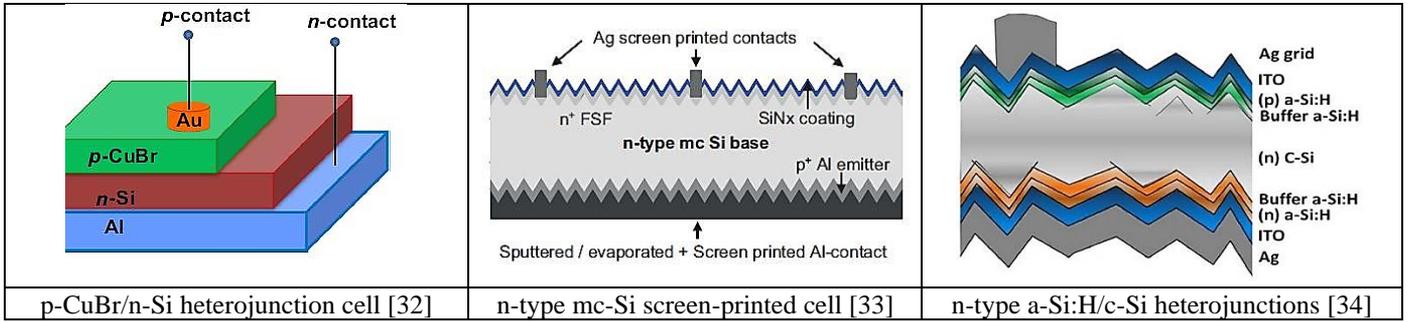
Fu et al. [16] used electrochemical measurements and that the CIGS thin film is of a p-type. Dharmadasa [17] suggested a novel concept for the development of CIGS material to be used in solar cells. The work conducted by Liang et al. [18] revealed that CIGS films grown at 450 and 500°C have better stoichiometric composition. Van Puyvelde et al. [19] suggested using flexible polymer substrates instead of rigid glass in the fabrication of Cu (In, Ga) Se<sub>2</sub> (CIGS) thin-film solar cells to reduce the cost.

Other interesting works on GICS devices may be found in the literature (Sobayel et al. [20], Li et al. [21], Farooq et al. [22], Sharbati et al. [23], Bouchama et al. [24], Saifullah et al. [25], Mallem et al. [26], Ding et al. [27], Procel et al. [28], Richter et al. [29], Tao et al. [30], Ok et al. [31], Rajani et al. [32], Singh et al. [33], and Jay et al. [34]). They also presented in Table 1.

In the present paper, the photovoltaic structure to be studied is based on a CIGS absorber with an alternative buffer layer such as ZnO as a window layer and a front contact in Molybdenum (Mo) taken as front contact. This configuration is used for a CIGS solar cell.

**Table 1.** PV cells with vs. solar material structures

<p>CIGS/WS<sub>2</sub> cell [20]</p>	<p>CIGS cell with LDS layer on top [21]</p>	<p>CIGS Cell with vs. effective layers [22]</p>
<p>Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/CIGS tandem cell [23]</p>	<p>Superstrate CIGS cell [24]</p>	<p>Completed CIGS cell [25]</p>
<p>TMO/Si heterojunction solar cell [26]</p>	<p>n-type Si PERT bifacial cell [27]</p>	<p>p-type c-Si solar cell [28]</p>
<p>n-type silicon solar cell [29]</p>	<p>TOP-Con silicon solar cell [30]</p>	<p>N-type front junction Si solar cell [31]</p>

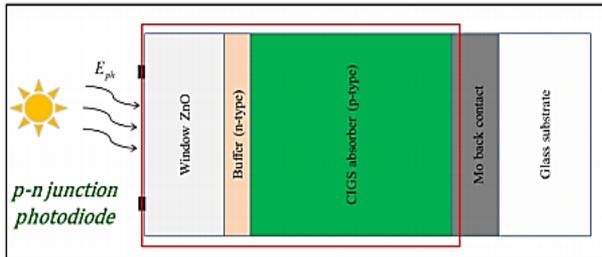


**Table 2.** Parameters of the solar cell using SCAPS simulation

Physical and optical parameters	1 <sup>st</sup> layer: CIGS	2 <sup>nd</sup> layer: CdS	3 <sup>rd</sup> layer: ZnO
Thickness ( $\mu\text{m}$ )	3.000	0.050	0.200
Bandgap (eV)	1.100	2.400	3.300
Electron affinity (eV)	4.500	4.200	4.450
Dielectric permittivity (relative)	13.600	10.000	9.000
CB effective density of states ( $1/\text{cm}^3$ )	6.595E+17	2.500E+18	9.999E+16
VB effective density of states ( $1/\text{cm}^3$ )	1.855E+19	9.000E+18	9.950E+19
Electron thermal velocity (cm/s)	1.000E+7	1.000E+7	1.000E+7
Hole thermal velocity (cm/s)	1.000E+7	1.000E+7	1.000E+7
Electron mobility ( $\text{cm}^2/\text{Vs}$ )	1.000E+2	1.000E+2	1.000E+2
Hole mobility ( $\text{cm}^2/\text{Vs}$ )	2.500E+1	2.500E+1	2.500E+1
Shallow uniform acceptor density ND ( $1/\text{cm}^3$ )	2.200E+18	2.200E+18	2.200E+18
Shallow uniform acceptor density NA ( $1/\text{cm}^3$ )	1.800E+19	1.800E+19	1.800E+19

## 2. THE CIGS-BASED SOLAR CELL BY SCAPS

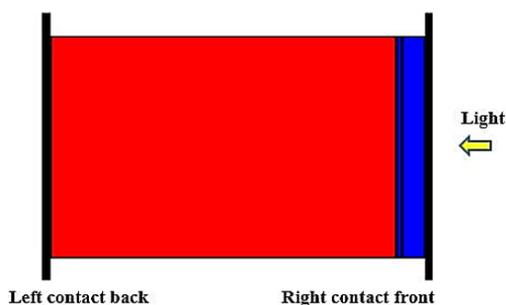
The structure developed by Gloeckler [35] was used a reference for this work. The diagram of the thin-film CIGS solar cell is highlighted in Figure 1.



**Figure 1.** CIGS solar cell with a thin film

### 2.1 Physical and optical parameters of the cell layer with CIGS

The parameters of the ZnO, CdS and CIGS materials used in the simulation of the solar cell are presented in Table 2. The efficiency of the simulated device (Figure 2) was found to be about 17.71%, so an attempt is made to increase this value by changing some parameters.



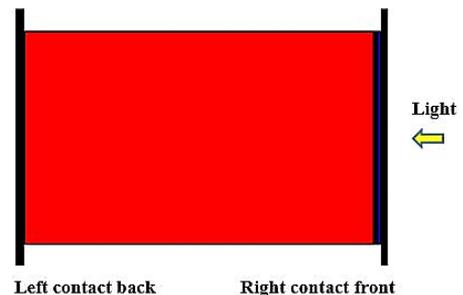
**Figure 2.** The CIGS-based solar cell

## 3. THE CIGS-BASED SOLAR CELL MODIFIED

The two electrical (doping) and technological (thickness) parameters of the three layers (ZnO, CdS, CIGS) were optimized to increase the overall efficiency of the device. In this article, we are interested in studying the impact of layers thicknesses on the physical and optical parameters of the CIGS-based solar cell.

- Physical and optical parameters of the 1<sup>st</sup>layer: Modified CIGS
- Thickness:  $3.00 \rightarrow 3.9 \mu\text{m}$
- Physical and optical parameters of the 2<sup>nd</sup>layer: Modified CdS
- Thickness:  $0.050 \rightarrow 0.020 \mu\text{m}$
- Physical and optical parameters of the 3<sup>rd</sup>layer: Modified ZnO
- Thickness:  $0.20 \rightarrow 0.043 \mu\text{m}$

So, the new cell becomes (Figure 3):



**Figure 3.** CIGS-based solar cell modified

### 3.1 Model validation

The photovoltaic characteristics of the CIGS-based solar cell are summarized in Table 3. Our results obtained numerically and those of Ref. [35] are compared. As remarked, the validation indicates the accuracy of our results.

**Table 3.** Solar cell parameters deduced from calculated IV-curve

Solar cell parameters	Results of [35]	Simulation results of our work
Open circuit voltage Voc (Volt)	0.64	0.79
Short-circuit current Jsc (mA/cm <sup>2</sup> )	33.72	35.20
Filling factor FF (%)	81.57	83.86
Efficiency $\eta$ (%)	17.71	23.40

**Table 4.** Effect of different thicknesses of CIGs

Thickness X (CIGs) ( $\mu\text{m}$ )	Efficiency $\eta$ (%)		Filling factor FF (%)		Short-circuit current Jsc (mA/cm <sup>2</sup> )		Open circuit voltage Voc (V)	
	Reference structure	New structure	Reference structure	New structure	Reference structure	New structure	Reference structure	New Structure
0.5	13.12	16.68	77.22	78.30	28.572725	29.053462	0.5945	0.7332
1	15.30	19.93	79.80	81.74	30.919552	31.886486	0.6203	0.7646
1.5	16.41	21.42	80.79	82.83	32.186582	33.268252	0.6311	0.7773
2	17.06	22.26	81.20	83.34	32.935091	34.057531	0.6378	0.7841
2.5	17.46	22.76	81.42	83.62	33.408870	34.549177	0.6417	0.7880
3	17.71	23.08	81.57	83.75	33.720319	34.869094	0.6439	0.7904
3.5	17.88	23.29	81.66	83.83	33.929208	35.081990	0.6453	0.7920
3.9	17.97	23.40	81.70	83.86	34.046703	35.200983	0.6461	0.7928

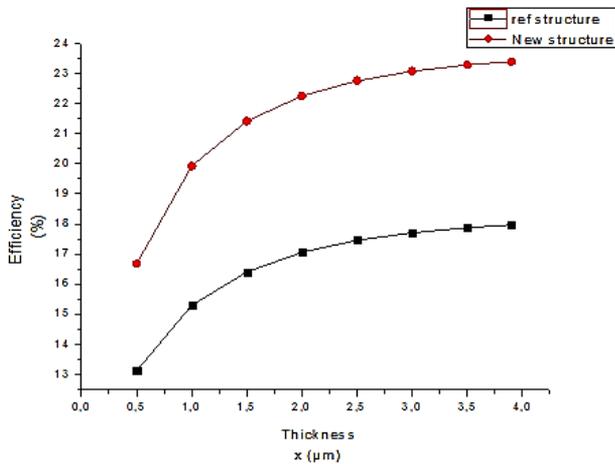
## 4. RESULTS AND DISCUSSION

### 4.1 Effect of the CIGS absorber layer

The absorber is the part of the cell in which the photons will be converted into electron-hole pairs. In this case, it is a p-type semiconductor of the family I-III-VI, the different variants of which have already been studied lead to the following general formula: (Cu, Ag) (In, Ga, Al) (Se, S, Te)<sub>2</sub>. Substitution of Cu with silver, of indium with gallium or aluminum, selenium by sulfur or tellurium, makes it possible to modify the material properties such as its prohibited bandwidth. The most developed compound in research and industry is Cu (In, Ga) Se<sub>2</sub>. Figure 4 indicates the changes in the efficiency vs. the thickness of the CIGS layer. In addition, Table 4 summarizes the effect of different thicknesses of CIGs.

These results show an increased efficiency with the rise of the thickness of the CIGS absorber layer.

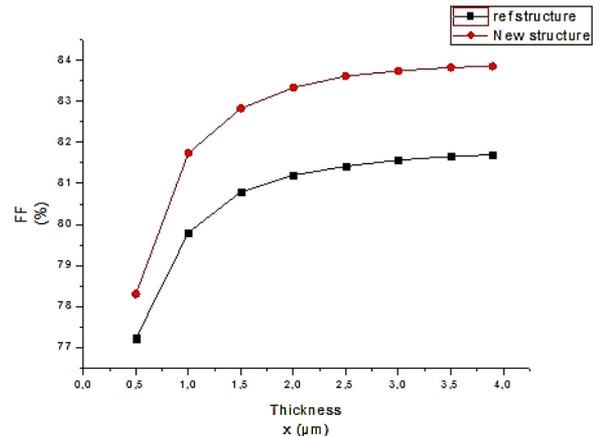
The results of the changes in the filling factor vs. the thickness of the CIGS layer are given in Figure 5. The figure shows an augmentation in the filling factor with the rise of the thickness of the CIGS absorber layer.



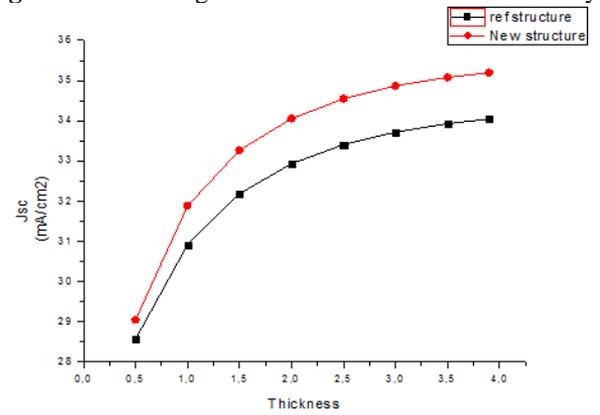
**Figure 4.** Changes in the efficiency vs. the thickness of the CIGS layer

The changes in the short-circuit current vs. the thickness of the CIGS layer is provided in Figure 6, where an augmentation in the short-circuit current was found when the thickness of the CIGS absorber layer increases.

Figure 7 reveals the changes in the open circuit voltage vs. the thickness of the CIGS layer. In addition, the effect different thicknesses of CdS are given in Table 5. It is well illustrated that the open circuit voltage increases when the thickness of the CIGS absorber layer increases.



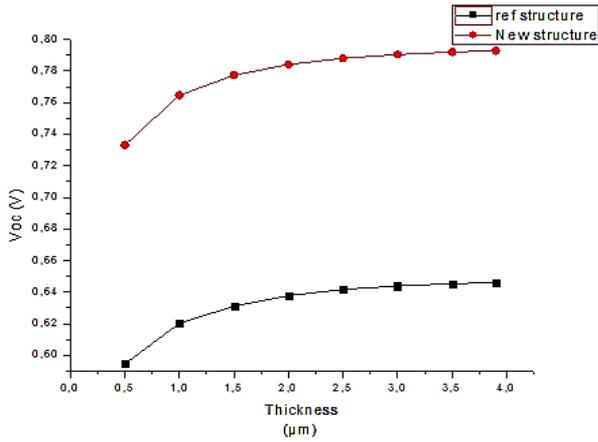
**Figure 5.** The filling factor vs. the thickness of CIGS layer



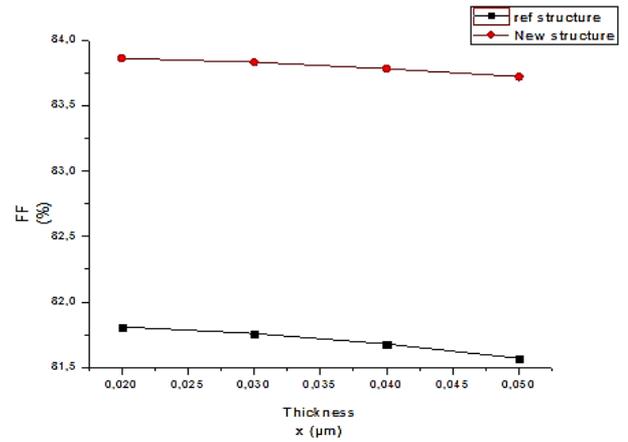
**Figure 6.** Changes in the short-circuit current vs. the thickness of the CIGS layer

**Table 5.** Effect of different thicknesses of CdS

Thickness X (CdS) ( $\mu\text{m}$ )	Efficiency $\eta$ (%)		Filling factor FF (%)		Short-circuit current Jsc ( $\text{mA}/\text{cm}^2$ )		Open circuit voltage Voc (V)	
	Reference structure	New structure	Reference structure	New structure	Reference structure	New structure	Reference structure	New structure
0.02	18.09	23.40	81.81	83.86	34.310611	35.200983	0.6444	0.7928
0.03	18.00	23.32	81.76	83.83	34.168326	35.093693	0.6443	0.7927
0.04	17.87	23.19	81.68	83.78	33.972845	34.928037	0.6441	0.7926
0.05	17.71	23.02	81.57	83.72	33.720319	34.703438	0.6439	0.7924



**Figure 7.** Changes in the open circuit voltage vs. the thickness of the CIGS layer



**Figure 9.** Changes in the Filling factor vs. the thickness of the CdS layer

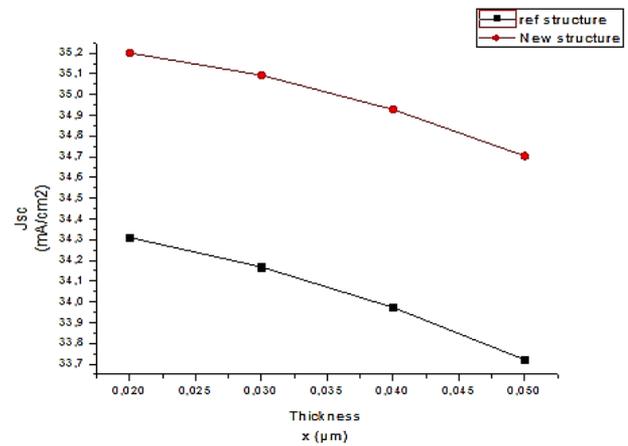
#### 4.2 Effect of the CdS-based buffer layer

The CdS-based buffer layer consists of an N-type semiconductor whose forbidden band  $E_g$  is very wide compared to that of the CIGS absorber. This layer adapts the width of the forbidden band between the absorber and the window layer and limits the recombination of carriers at the interface of these two layers.

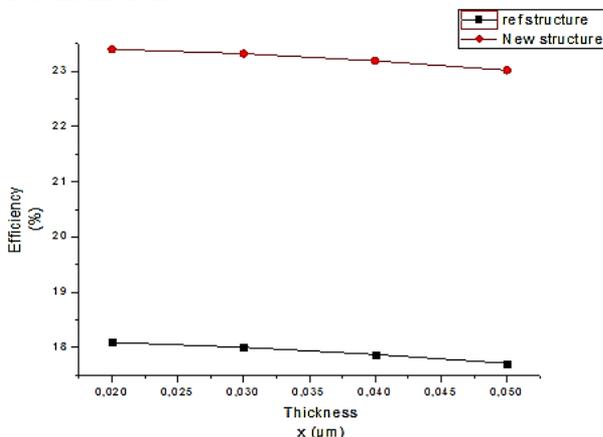
It also makes it possible to protect the surface of the absorber during the sputtering deposition of the ZnO layer, which can cause defects on the surface of the CIGS. However, CdS remains preferred because it always gives high yields.

However, its forbidden bandwidth, equal to relatively small, generates optical losses, so that significant quantities of light are absorbed before being able to reach the CIGS layer, even for CdS layers as thin as.

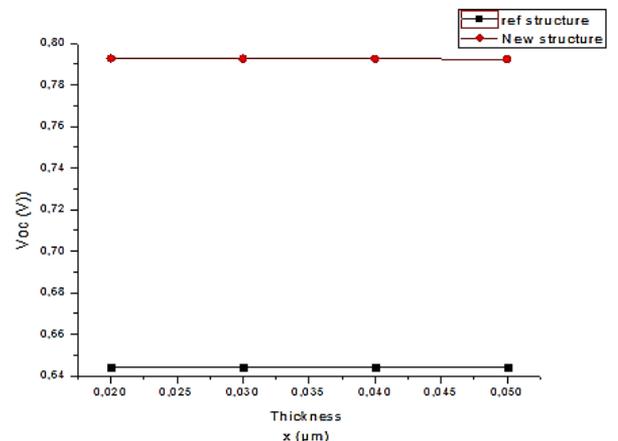
The photons absorbed in the CdS do not participate in the photocurrent, because of the short diffusion length of the minority carriers (holes) in the CdS, which leads to a high rate of recombination.



**Figure 10.** Changes in the short-circuit current vs. the thickness of the CdS layer



**Figure 8.** Changes in the Efficiency vs. the thickness of the CdS layer



**Figure 11.** Changes in the short-circuit current vs. the thickness of the CdS layer

**Table 6.** Effect of different thicknesses of ZnO

Thickness X (CdS) ( $\mu\text{m}$ )	Efficiency $\eta$ (%)		Filling factor FF (%)		Short-circuit current $J_{sc}$ ( $\text{mA}/\text{cm}^2$ )		Open circuit voltage $V_{oc}$ (V)	
	Reference structure	New structure	Reference structure	New structure	Reference structure	New structure	Reference structure	New structure
0.043	17.96	23.40	81.56	83.86	34.188191	35.200983	0.6443	0.7928
0.05	17.94	23.37	81.56	83.86	34.144041	35.148259	0.6442	0.7927
0.10	17.82	23.19	81.57	83.85	33.912543	34.895487	0.6441	0.7925
0.15	17.75	23.10	81.57	83.84	33.789413	34.766966	0.6440	0.7924
0.20	17.71	23.05	81.57	83.84	33.720319	34.693751	0.6439	0.7924

For this reason, and in addition to the constraints linked to the use of Cadmium (Cd) which is a toxic element, many studies are carried out to replace CdS by other materials, among them, one can quote (OH, S), Zn (O, OH), ZnS.

The changes in the efficiency vs. the thickness of the CdS layer is plotted in Figure 8, where a decrease in the efficiency is observed with increasing thickness of the CdS layer.

The changes in the filling factor vs. the thickness of the CdS layer is plotted in Figure 9. This figure shows that the filling factor is almost constant with increasing thickness of the CdS layer.

The changes in the short-circuit current vs. the thickness of the CdS layer is given in Figure 10. As remarked, the short-circuit current decreases with increasing thickness of the CdS layer.

Figure 11 summarizes the changes in the open circuit voltage vs. the thickness of the CdS layer.

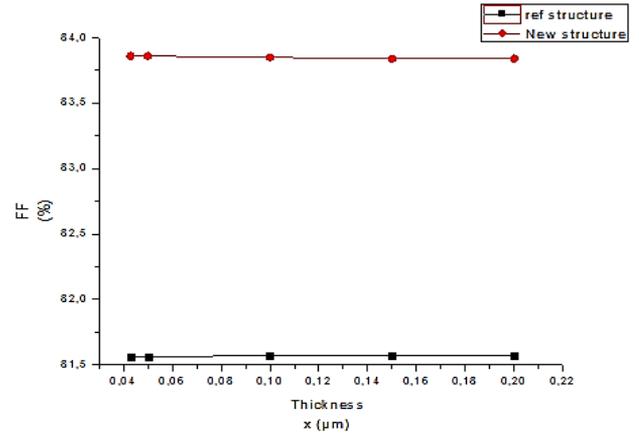
In additions, the effect of different thicknesses is highlighted in Table 6. As shown, the open circuit voltage is almost constant with increasing thickness of the CdS layer.

### 4.3 Effect of the ZnO window layer

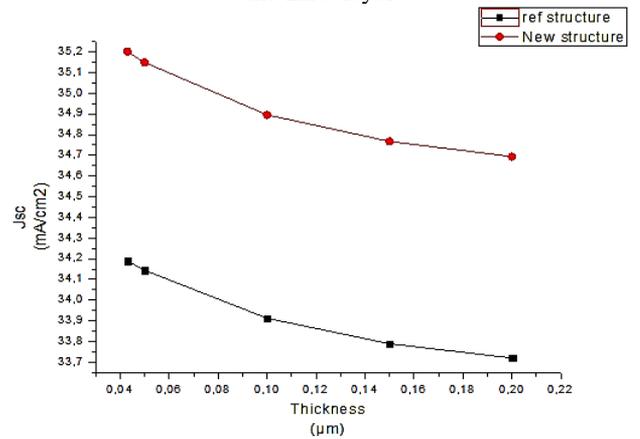
One of the two electrodes is transparent to allow the transmission of light sufficiently at the P-N junction region and towards the CIGS absorbent and conductive layer to transport the photocurrent generated by the solar cell to the external circuit.

This electrode is a thin layer of transparent conductive oxide (TCO), a thin lined metal grid (Ni-Al) is deposited on the window layer so as to reduce its series resistance and collect the charges generated by the device.

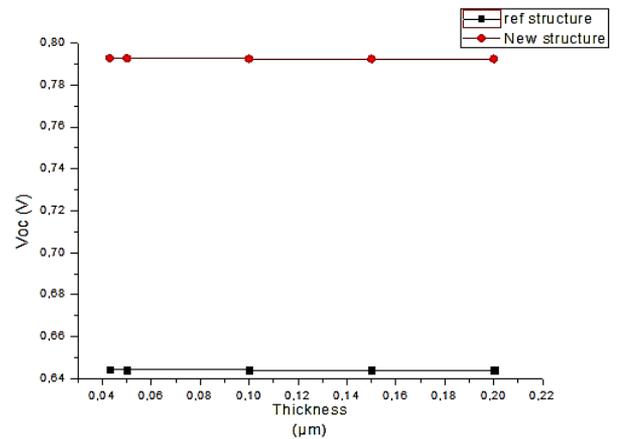
Ni acts as a bonding layer and allows to avoid the oxidation of Al linked to the underlying presence of TCO. TCO, generally used for CIGS cells, and Zinc oxide (ZnO) deposited by sputtering.



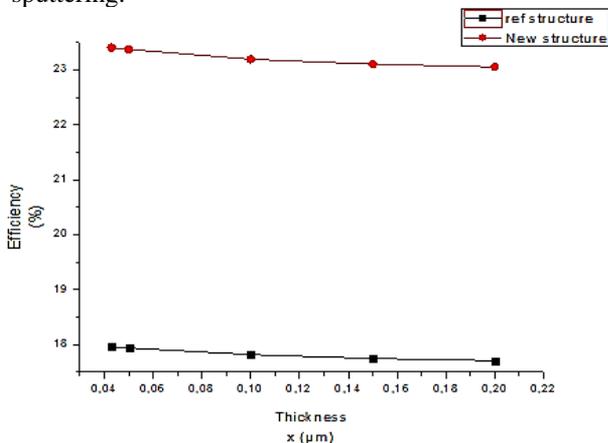
**Figure 13.** Changes in the Filling factor vs. the thickness of the ZnO layer



**Figure 14.** Changes in the short-circuit current vs. the thickness of the ZnO layer



**Figure 15.** Changes in the Short-circuit current vs. the thickness of the ZnO layer



**Figure 12.** Changes in the efficiency vs. the thickness of the ZnO layer

The changes in the efficiency vs. the thickness of the ZnO layer is indicated in Figure 12. It is clearly illustrated that the efficiency decreases with increasing thickness of the ZnO layer.

Figure 13 claims the changes in the filling factor vs. the thickness of the ZnO layer. As shown, the filling factor is almost constant with increasing thickness of the ZnO layer.

Figure 14 illustrates the changes in the short-circuit current vs. the thickness of the ZnO layer. As observed, the short-circuit current decreases with increasing thickness of the ZnO layer.

Figure 15 plots the changes in the open circuit voltage vs. the thickness of the ZnO layer. The figure shows that the open circuit voltage is almost constant with increasing thickness of the ZnO layer.

## 5. CONCLUSION

The numerical results obtained by the software SCAPS for a CIGS solar cell were highlighted. At the beginning, a structure model was chosen according to the literature to confirm the performance of our software and to establish a calculation code that is specific to the structures studied.

Then, the effects of the thickness of the three layers ZnO, CdS and CIGS on the photovoltaic conversion efficiency ( $\eta$ ), the filling factor (FF); short-circuit current ( $J_{sc}$ ), and open circuit voltage ( $V_{oc}$ ) were investigated.

The efficiency of the cell of 1st case was found to be about 17.71%, and the efficiency of the modified cell was equal to 23.40%. We note that the thickness has a very significant impact on the improvement in the solar cell effectiveness.

Aiming to have a good performance, it is necessary to decrease the thickness of the ZnO window layer and the CdS buffer layer to increase the thickness of the CIGS absorber up to 3.9  $\mu\text{m}$ .

## REFERENCES

- [1] Saïdi, H., Alaya, C.B., Boujmil, M.F., Durand, B., Lazzari, J.L., Bouaïcha, M. (2020). Physical properties of electrodeposited CIGS films on crystalline silicon: Application for photovoltaic hetero-junction. *Current Applied Physics*, 20(1): 29-36. <https://doi.org/10.1016/j.cap.2019.09.015>
- [2] Hadjab, M., Ibrir, M., Berrah, S., Abid, H., Saeed, M.A. (2018). Structural, electronic and optical properties for chalcopyrite semiconducting materials: ab-initio computational study. *Optik*, 169: 69-76. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2018.05.044>
- [3] Madhuri, K., Kannan, P.K., Chaudhari, S., Dhage, S.R., Dey, S.R. (2020). Effect of annealing time and heat flux on solvothermal synthesis of CIGS nanoparticles. *Materials Today: Proceedings*, 21: 1882-1887. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.01.245>
- [4] Mandati, S., Sarada, B.V. (2020). Electrodeposited chalcopyrite  $\text{CuInGaSe}_2$  absorbers for solar energy harvesting. *Materials Science for Energy Technologies*, 3: 440-445. <https://doi.org/10.1016/j.mset.2020.03.001>
- [5] Ramasamy, M., Jung, C.Y., Yeon, Y.B., Lee, C.W. (2017). Electrochemical Atomic Layer Deposition of  $\text{CuIn}_{(1-x)}\text{Ga}_x\text{Se}_2$  on Mo Substrate. *Journal of The Electrochemical Society*, 164(14): D1006. <https://doi.org/10.1149/2.1231714jes>
- [6] Kotbi, A., Hartiti, B., Fadili, S., Labrim, H., Ridah, A., Thevenin, P. (2020). Synthesis and characterization of sprayed CIGS thin films for photovoltaic application. *Materials Today: Proceedings*, 24: 66-70. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2019.07.537>
- [7] Sheu, H.H., Hsu, Y.T., Jian, S.Y., Liang, S.C. (2016). The effect of Cu concentration in the photovoltaic efficiency of CIGS solar cells prepared by co-evaporation technique. *Vacuum*, 131: 278-284. <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2016.07.008>
- [8] Jäger-Waldau, A. (2012). Progress in chalcopyrite compound semiconductor research for photovoltaic applications and transfer of results into actual solar cell production. In *Practical Handbook of Photovoltaics* (pp. 373-395). Academic Press. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-385934-1.00011-8>
- [9] Tai, K.F., Kamada, R., Yagioka, T., Kato, T., Sugimoto, H. (2017). From 20.9 to 22.3% Cu (In, Ga)(S, Se)<sub>2</sub> solar cell: reduced recombination rate at the heterojunction and the depletion region due to K-treatment. *Japanese Journal of Applied Physics*, 56(8S2): 08MC03. <https://doi.org/10.7567/JJAP.56.08MC03>
- [10] Kovacic, M., Krc, J., Lipovsek, B., Chen, W.C., Edoff, M., Bolt, P. J., Topic, M. (2019). Light management design in ultra-thin chalcopyrite photovoltaic devices by employing optical modelling. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 200: 109933. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2019.109933>
- [11] Akhavan, V.A., Goodfellow, B.W., Panthani, M.G., Steinhagen, C., Harvey, T.B., Stolle, C.J., Korgel, B.A. (2012). Colloidal CIGS and CZTS nanocrystals: A precursor route to printed photovoltaics. *Journal of Solid State Chemistry*, 189: 2-12. <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2011.11.002>
- [12] Pluengphon, P., Bovornratanaraks, T., Vannarat, S., Pinsook, U. (2012). The effects of Na on high pressure phases of  $\text{CuIn}_0.5\text{Ga}_0.5\text{Se}_2$  from ab initio calculation. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 24(9): 095802. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/24/9/095802>
- [13] Lara-Lara, B., Fernández, A.M. (2019). Growth improved of CIGS thin films by applying mechanical perturbations to the working electrode during the electrodeposition process. *Superlattices and Microstructures*, 128: 144-150. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2019.01.024>
- [14] Park, S.J., Cho, Y., Moon, S.H., Kim, J.E., Lee, D.K., Gwak, J., Kim, J.Y., Kim, D.W., Min, B.K. (2014). A comparative study of solution-processed low-and high-band-gap chalcopyrite thin-film solar cells. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 47(13): 135105. <https://orcid.org/0000-0002-5687-7739>
- [15] Jheng, B.T., Liu, P.T., Chang, Y.P., Wu, M.C. (2013). Polycrystalline  $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$  thin films and PV devices sputtered from a binary target without additional selenization. *ECS Transactions*, 50(49): 53. <https://doi.org/10.1149/05049.0053ecst>
- [16] Fu, Y.P., You, R.W., Lew, K.K. (2009).  $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$  Absorber Layer Fabricated by Pulse-Reverse Electrodeposition Technique for Thin Films Solar Cell. *Journal of The Electrochemical Society*, 156(12): D553. <https://doi.org/10.1149/1.3240330>
- [17] Dharmadasa, I.M. (2009). Fermi level pinning and effects on  $\text{CuInGaSe}_2$ -based thin-film solar cells.

- Semiconductor Science and Technology, 24(5): 055016. <https://doi.org/10.1088/0268-1242/24/5/055016>
- [18] Liang, G.X., Fan, P., Cao, P.J., Zheng, Z.H., Zhang, D.P. (2013). Properties of CuInGaSe<sub>2</sub> thin-film prepared from multiple layers via ion beam sputtering method. *ECS Solid State Letters*, 3(3): P23. <https://doi.org/10.1149/2.002403ssl>
- [19] Van Puyvelde, L., Lauwaert, J., Tempez, A., Devulder, W., Nishiwaki, S., Pianezzi, F., Detavernier, C., Tiwari, A.N., Vrielinck, H. (2015). Electronic defect study on low temperature processed Cu (In, Ga) Se<sub>2</sub> thin-film solar cells and the influence of an Sb layer. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 48(17): 175104. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/48/17/175104>
- [20] Sobayel, K., Shahinuzzaman, M., Amin, N., Karim, M. R., Dar, M. A., Gul, R., Alghoul, M.A., Sopian, K., Hasan, A.K.M., Akhtaruzzaman, M. (2020). Efficiency enhancement of CIGS solar cell by WS<sub>2</sub> as window layer through numerical modelling tool. *Solar Energy*, 207: 479-485. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2020.07.007>
- [21] Li, Y., Lin, H., Zeng, J., Chen, J., Chen, H. (2019). Enhance short-wavelength response of CIGS solar cell by CdSe quantum disks as luminescent down-shifting material. *Solar Energy*, 193: 303-308. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2019.09.071>
- [22] Farooq, W., Alshahrani, T., Kazmi, S.A.A., Iqbal, J., Khan, H.A., Khan, M., Raja, A.A., ur Rehman, A. (2021). Materials optimization for thin-film copper indium gallium selenide (CIGS) solar cell based on distributed bragg reflector. *Optik*, 227: 165987. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2020.165987>
- [23] Sharbati, S., Gharibshahian, I., Orouji, A.A. (2019). Designing of Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/CIGS tandem solar cell by analytical model. *Solar Energy*, 188: 1-9. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2019.05.074>
- [24] Bouchama, I., Boudour, S., Bouarissa, N., Rouabah, Z. (2017). Quantum and conversion efficiencies optimization of superstrate CIGS thin-films solar cells using In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> buffer layer. *Optical Materials*, 72: 177-182. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2017.05.056>
- [25] Saifullah, M., Moon, J.H., Ahn, S., Gwak, J., Ahn, S., Kim, K., Eo, Y.J., Yun, J.H. (2016). Effect of Cu content on the photovoltaic properties of wide bandgap CIGS thin-film solar cells prepared by single-stage process. *Current Applied Physics*, 16(11): 1517-1522. <https://doi.org/10.1016/j.cap.2016.08.019>
- [26] Mallem, K., Kim, Y.J., Hussain, S.Q., Dutta, S., Le, A.H.T., Ju, M., Park, J., Cho, Y.H., Kim, Y., Cho, E.C., Yi, J. (2019). Molybdenum oxide: A superior hole extraction layer for replacing p-type hydrogenated amorphous silicon with high efficiency heterojunction Si solar cells. *Materials Research Bulletin*, 110: 90-96. <https://doi.org/10.1016/j.materresbull.2018.10.018>
- [27] Ding, D., Lu, G., Li, Z., Zhang, Y., Shen, W. (2019). High-efficiency n-type silicon PERT bifacial solar cells with selective emitters and poly-Si based passivating contacts. *Solar Energy*, 193: 494-501. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2019.09.085>
- [28] Procel, P., Löper, P., Crupi, F., Ballif, C., Ingenito, A. (2019). Numerical simulations of hole carrier selective contacts in p-type c-Si solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 200: 109937. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2019.109937>
- [29] Richter, A., Benick, J., Feldmann, F., Fell, A., Hermle, M., Glunz, S.W. (2017). n-Type Si solar cells with passivating electron contact: Identifying sources for efficiency limitations by wafer thickness and resistivity variation. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 173: 96-105. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2017.05.042>
- [30] Tao, K., Li, Q., Hou, C., Jiang, S., Wang, J., Jia, R., Sun, Y., Li, Y.T., Jin, Z., Liu, X. (2017). Application of a-Si/ $\mu$ c-Si hybrid layer in tunnel oxide passivated contact n-type silicon solar cells. *Solar Energy*, 144: 735-739. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2017.01.061>
- [31] Ok, Y.W., Upadhyaya, A.D., Tao, Y., Zimbardi, F., Ryu, K., Kang, M.H., Rohatgi, A. (2014). Ion-implanted and screen-printed large area 20% efficient N-type front junction Si solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 123: 92-96. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2014.01.002>
- [32] Rajani, K.V., Daniels, S., Rahman, M., Cowley, A., McNally, P.J. (2013). Deposition of earth-abundant p-type CuBr films with high hole conductivity and realization of p-CuBr/n-Si heterojunction solar cell. *Materials Letters*, 111: 63-66. <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2013.08.042>
- [33] Singh, S., Dross, F., Posthuma, N.E., Mertens, R. (2011). Large area 15.8% n-type mc-Si screen-printed solar cell with screen printed Al-alloyed emitter. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 95(4): 1151-1156. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2010.12.043>
- [34] Jay, F., Muñoz, D., Desrues, T., Pihan, E., De Oliveira, V.A., Enjalbert, N., Jouini, A. (2014). Advanced process for n-type mono-like silicon a-Si: H/c-Si heterojunction solar cells with 21.5% efficiency. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 130: 690-695. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2014.02.025>
- [35] Gloeckler, M., Sites, J.R., Metzger, W.K. (2005). Grain-boundary recombination in Cu (In, Ga) Se<sub>2</sub> solar cells. *Journal of Applied Physics*, 98(11): 113704. <https://doi.org/10.1063/1.2133906>

**RESUME :** Dans cette thèse nous avons effectué une simulation des cellules solaires simple jonction en couches minces à base de Cu (In<sub>1-x</sub> Gax) Se<sub>2</sub>, nous avons utilisé le logiciel SCAPS pour simuler les caractéristiques électriques de cette cellule solaire. Le rendement de la cellule du 1er cas est de: 17,71% et le rendement de la cellule de modification devient: 23,40%, On note que l'épaisseur a un impact très important sur l'amélioration du rendement de la cellule solaire. Il est nécessaire de diminuer l'épaisseur de la couche de fenêtre ZnO et de la couche tampon CdS afin d'augmenter l'épaisseur de l'absorbeur CIGS à 3,9 µm pour avoir de bonnes performances. On peut résumer les résultats de l'étude de simulation comme suite: L'augmentation de l'épaisseur de la couche en ZnO diminue le rendement de conversion de la cellule η ; L'augmentation de l'épaisseur de la couche de type n en CdS diminue aussi le rendement de la cellule solaire ; L'augmentation de l'épaisseur de la couche absorbant de type p en CIGS entraîne une augmentation dans le rendement η et le facteur de forme FF avec des petites valeurs, où la tension de circuit ouvert V<sub>co</sub> presque constant. L'augmentation du dopage de la couche en ZnO due à la croissance du rendement et le facteur de forme FF.

**Mots clé :** Cu (In<sub>1-x</sub> Gax) Se<sub>2</sub>, ZnO, Couche tampon, SCAPS1-D

**ABSTRACT:** In this thesis we have performed a simulation of single junction thin film solar cells based on Cu (In<sub>1-x</sub> Gax) Se<sub>2</sub>.we used the SCAPS software to simulate the electrical characteristics of this solar cell.The efficiency of the cell of the 1st case is: 17,71% and the efficiency of the modification cell becomes: 23,40%.We note that the thickness has a very important impact on the improvement of the efficiency of the solar cell.It is necessary to decrease the thickness of the ZnO window layer and CdS buffer layer to increase the thickness of the CIGS absorber to 3.9 µm for good performance.The results of the simulation study can be summarized as follows: Increasing the thickness of the ZnO layer decreases the conversion efficiency η of the solar cell.The increase in the thickness of the CdS n-type layer also decreases the efficiency of the solar cell.Increasing the thickness of the p-type absorber layer in CIGS leads to an increase in the efficiency η and the form factor FF with small values, where the open circuit voltage V<sub>co</sub> almost constant.The increase in doping of the ZnO layer due to the increase in yield and the FF form factor.

**Keywords:** Cu (In<sub>1-x</sub>Gax) Se<sub>2</sub>, ZnO, Buffer layer, SCAPS1-D

**ملخص:** في هذه الأطروحة أجرينا محاكاة للخلايا الشمسية ذات الأغشية الرقيقة أحادية التوصيل Cu (In<sub>1-x</sub> Gax) Se<sub>2</sub> استخدمنا برنامج SCAPS لمحاكاة الخصائص الكهربائية لهذه الخلايا الشمسية. كفاءة خلية الحالة الأولى: 17.71%. وكفاءة خلية التعديل تصبح: 23.40%. ، ويلاحظ أن للسمك تأثير مهم جدًا في تحسين كفاءة الخلية الشمسية. من الضروري تقليل سمك طبقة نافذة ZnO وطبقة عازلة CdS من أجل زيادة سماكة ماص CIGS إلى 3.9 ميكرومتر للحصول على أداء جيد. يمكننا تلخيص نتائج دراسة المحاكاة على النحو التالي: الزيادة في سمك طبقة ZnO يقلل من كفاءة التحويل للخلية ؛ تؤدي زيادة سمك طبقة CdS من النوع n أيضًا إلى تقليل كفاءة الخلية الشمسية ؛ تؤدي زيادة سمك الطبقة الماصة من النوع p في CIGS إلى زيادة الكفاءة η وعامل الشكل FF بقيم صغيرة ، حيث يكون جهد الدائرة المفتوحة V<sub>co</sub> ثابتًا تقريبًا. زيادة المنشطات لطبقة ZnO بسبب زيادة الكفاءة وعامل الشكل FF.

**الكلمات المفتاحية:** SCAPS1-D ، الطبقة العازلة ، ZnO ، Cu (In<sub>1-x</sub> Gax) Se<sub>2</sub>