

N° d'ordre :

Année : 2017/2018

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

UNIVERSITE DJILLALI LIABES DE SIDI BEL ABBES



Faculté de Génie Electrique

Département d'électronique

THESE

Pour l'obtention du grade de

DOCTEUR EN SCIENCES

Option : **Microélectronique**

Présentée par

M^{elle} MAACHOU Fatima

Thème

Analyse et optimisation des paramètres photovoltaïques dans les cellules solaires à simple jonction, tandem et triple-jonction en technologie couches minces de silicium

Thèse soutenue le : **15 Février 2018**

Devant le jury composé de :

M ^{me} S. TIZI	Professeur de l'Université de Sidi Bel Abbès	Présidente
M ^{elle} B.ZEBENOUT	Professeur de l'Université de Sidi Bel Abbès	Encadreur
M ^{me} A. OULD ABBAS	Professeur de l'Université de Tlemcen	Examineur
M ^r M. SAHNOUN	Professeur de l'Université de Mascara	Examineur
M ^{me} Z. BENAMARA	Professeur de l'Université de Sidi Bel Abbès	Membre Invité

Remerciements

Ce travail de thèse a été effectué au sein du Laboratoire de Microélectronique Appliquée de l'Université Djillali Liabès de Sidi Bel Abbès, d'ailleurs je voudrais remercier la directrice du Laboratoire Madame Z.BENAMARA, Professeur à l'Université de Sidi Bel Abbès, de m'y avoir accueilli.

J'adresse mes profonds remerciements à mon encadreur, Mademoiselle B.ZEBENTOUT, Professeur à l'Université de Sidi Bel Abbès, pour m'avoir donné l'opportunité de réaliser cette thèse, pour ses encouragements, sa disponibilité et son attention.

Je remercie le Professeur Monsieur K.KHIROUNI, Directeur du laboratoire de physique des matériaux et des nanomatériaux appliquée à l'environnement (La PhyMNE) attaché à l'Université de Gabès (Tunisie), de nous avoir accueilli dans son laboratoire, pour ses longues discussions et son hospitalité.

Je remercie le Docteur YIMING Liu de l'Institut de photoélectronique des dispositifs en couches minces et de technologie de l'Université de Nankai (Chine) pour avoir mis à notre disposition le logiciel wxAMPS3 encore sous développement et pour avoir apporté des éléments de réponses à nos questions.

Mes vifs remerciements sont adressés à Madame H.MANSOUR, Professeur à l'Université de Sidi Bel Abbès, et à Mademoiselle H.BOUDIAF, Maître Assistant Classe A à l'Université de Sidi Bel Abbès, pour leurs conseils et leurs encouragements.

J'adresse mes sincères remerciements à Madame S.TIZI, Professeur à l'Université de Sidi Bel Abbès, d'avoir accepté de présider mon jury de thèse.

Je remercie profondément Madame A.OULD ABBAS, Professeur à l'Université de Tlemcen, et Monsieur M.SAHNOUN, Professeur à l'Université de Mascara, d'avoir accepté d'examiner ce travail de thèse.

Je remercie encore une fois Madame Z.BENAMARA, Professeur à l'Université de Sidi Bel Abbès, de participer au jury de cette thèse en qualité de membre invité.

*À mes parents,
à mes frères et soeurs,
à ma famille et à mes ami(e)s.
Merci pour votre soutien au quotidien.*

Table des matières

Table des figures	viii
Liste des tableaux	xiv
Liste des abréviations	xv
Introduction générale	1
1 Les principes de la conversion photovoltaïque	4
1.1 L'histoire du photovoltaïque	4
1.2 Les différentes générations des cellules solaires	5
1.2.1 Cellules solaires de première génération	5
1.2.2 Cellules solaires de seconde génération	6
1.2.3 Cellules solaires de troisième génération	6
1.3 Notions préliminaires sur le rayonnement solaire	7
1.4 L'effet photoélectrique	9
1.4.1 L'effet photoélectrique dans les matériaux conducteurs	10
1.4.2 L'effet photoélectrique dans les semiconducteurs	11
1.4.2.1 Notions de gap direct et indirect	11
1.4.2.2 Transitions interbandes	11
1.5 Cellule solaire à jonction PN à base de silicium cristallin	13
1.5.1 Principe de fonctionnement	14
1.5.2 Caractéristique I(V) sous illumination	15
1.5.3 Schéma électrique équivalent d'une cellule solaire	17

1.6	Le processus d'absorption	18
1.7	Mécanismes de recombinaisons	18
1.7.1	Recombinaison radiative	19
1.7.2	Recombinaisons Auger	20
1.7.3	Recombinaisons Shockley-Read-Hall ou SRH	21
1.7.4	Recombinaison en surface	22
1.7.5	Durée de vie effective	24
1.8	Réponse spectrale et rendement quantique	25
1.9	Conclusion	26
2	Etude des propriétés du silicium amorphe hydrogéné	28
2.1	Structure atomique du silicium amorphe hydrogéné	28
2.2	Défauts de coordinations	30
2.3	Densité d'états	30
2.3.1	Les états de queues de bandes	32
2.3.2	Les liaisons pendantes	35
2.3.3	États pièges discrets	37
2.4	Passivation du silicium amorphe à l'hydrogène	38
2.5	Effet Staëbler-Wronski	39
2.6	Propriétés optiques du a-Si:H	40
2.6.1	Coefficient d'absorption	40
2.6.2	Notions de gap de mobilité et de gap optique dans le a-Si:H	41
2.7	Mécanismes de dopage dans le silicium amorphe hydrogéné	42
2.7.1	Effet du dopage sur la conductivité électrique du a-Si:H	42
2.7.2	Configurations des atomes dopants dans le a-Si:H	43
2.7.3	Distribution des atomes dopants dans le gap de mobilité du a-Si:H	45
2.8	Le silicium microcristallin hydrogéné	46
2.8.1	Histoire du silicium microcristallin hydrogéné	46
2.8.2	Microstructure du silicium microcristallin	47
2.8.3	Propriétés optoélectroniques du μ c-Si:H	48
2.9	Conclusion	49

3	Architecture des cellules solaires en couches minces de silicium	52
3.1	Architecture des cellules solaires en couches minces de silicium	52
3.1.1	Structure des cellules solaires à simple jonction	53
3.1.2	Couche fenêtre dans les cellules solaires à simple jonction	55
3.1.3	Principe de fonctionnement d'une cellule solaire à simple jonction p-i-n ou n-i-p	57
3.2	Les TCO dans les cellules solaires en couches minces de silicium	57
3.2.1	Les matériaux TCO utilisés pour les électrodes transparentes des cellules solaires	59
3.2.1.1	L'oxyde d'indium dopé à l'étain	59
3.2.1.2	L'oxyde d'étain	60
3.2.1.3	L'oxyde de zinc	60
3.3	Techniques de dépôts des couches minces	62
3.3.1	Définition d'un plasma froid	62
3.3.2	Le procédé de dépôt PECVD	63
3.3.2.1	Principe du procédé PECVD	63
3.3.2.2	Système de dépôt VHF-GD-PECVD	66
3.3.3	La pulvérisation magnétron radiofréquence	67
3.4	Conclusion	68
4	Simulation et optimisation des cellules solaires en technologie couches minces de silicium	70
4.1	Introduction	70
4.2	La modélisation numérique	71
4.2.1	Équations de base de la modélisation	72
4.2.1.1	Équation de Poisson	72
4.2.1.2	Équations de continuité	72
4.2.1.3	Équations de transport	73
4.2.2	Calcul de la densité volumique de charge	74
4.2.3	Résolution numérique du système d'équation de base	75
4.2.4	Description du logiciel de simulation AMPS-1D	76
4.2.5	Description des logiciels de simulation wxAMPS2	80

4.2.6	Description du logiciel de simulation wxAMPS3	84
4.3	Simulation et optimisation d'une cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H	88
4.3.1	Optimisation du gap de mobilité de la couche active de la cellule solaire p-i-n à base de a-Si:H	89
4.3.2	Optimisation de l'interface p-i de la cellule solaire p-i-n à base de a-Si:H	91
4.3.2.1	Analyse de l'influence de l'interface p-i sur la tension de circuit ouvert V_{co}	92
4.3.2.2	Insertion d'une couche buffer à l'interface p-i	95
4.3.3	Optimisation de l'épaisseur de la couche active de la cellule p-i-n à base de a-Si:H	98
4.4	Simulation et optimisation d'une cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de μ c-Si:H	100
4.5	Simulation des cellules solaires à structure multijonction	103
4.5.1	Principe d'une structure à multijonction	103
4.5.2	Simulation et optimisation d'une cellule solaire tandem mi- cromorphe à l'aide de l'AMPS-1D	105
4.5.3	Simulation de la cellule solaire tandem micromorphe à l'aide des logiciels wxAMPS	110
4.5.4	Simulation et optimisation d'une cellule solaire triple-jonction à l'aide des logiciels wxAMPS	114
4.6	Conclusion	119
Conclusion générale		122
Références bibliographiques		126
Annexes		139
Annexe A : Paramètres utilisés dans les simulations		140
A.1	Représentation des défauts de la bande interdite du a-Si:H dans AMPS- 1D	140
A.1.1	Représentation des niveaux pièges discrets	140
A.1.2	Représentation des états de queues de bande	141

A.1.3	Représentation des liaisons pendantes	142
A.2	Désignation des paramètres des défauts utilisés dans AMPS-1D . . .	144
A.3	Tableaux des paramètres de simulation utilisés dans l'AMPS-1D, le wxAMPS2 et le wxAMPS3	145
A.3.1	Tableau des paramètres généraux	145
A.3.2	Tableau des paramètres des défauts	146
A.4	Paramètres des contacts	147

Table des figures

1.1	Graphe de la société NREL (National Renewable Energy laboratory) montrant l'évolution des rendements produits en laboratoires, toutes filières confondues, depuis 1975	7
1.2	(a) Définition du coefficient Air-mass et (b) Spectre d'irradiance où AM0 est le spectre solaire hors atmosphère et AM1.5G le spectre solaire après traversée de l'atmosphère défini pour un angle zénithal de $48,2^\circ$	9
1.3	Structure de bande schématique d'un semiconducteur à gap direct (a) et à gap indirect (b).	12
1.4	Cellule solaire à jonction PN à base de silicium cristallin sous illumination.	13
1.5	(a) Caractéristiques courant-tension d'une cellule solaire à jonction PN sous illumination et à l'obscurité (b) Représentation conventionnelle de la courbe I(V).	16
1.6	Effet de la résistance série (a) et de la résistance parallèle (b) sur la caractéristique I(V) sous illumination.	17
1.7	Schéma électrique équivalent d'une cellule solaire à jonction PN.	18
1.8	Schéma illustrant les mécanismes de recombinaisons (a) Radiatif (b) Auger (c) Shockley-Read-Hall (SRH)	19
1.9	Schéma illustrant le mécanisme de recombinaison en surface	23
2.1	Tétraèdre de base dans le réseau du silicium cristallin.	29
2.2	Structure de réseau : (a) Silicium cristallin (c-Si) (b) Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H)	29
2.3	Densité d'état en fonction de l'énergie : (a) Silicium c-Si (b) Silicium a-Si:H	31
2.4	Processus de recombinaison via les liaisons pendantes	35

2.5	Coefficient d'absorption et profondeur de pénétration du a-Si:H, du c-Si et du silicium microcristallin ($\mu\text{c-Si:H}$)	40
2.6	Variation de la conductivité à température ambiante σ_{RT} du a-Si:H de type n et de type p, en fonction des rapports $N_{\text{PH}_3}/N_{\text{SiH}_4}$ et $N_{\text{B}_2\text{H}_6}/N_{\text{SiH}_4}$ respectivement	43
2.7	Types de configurations de l'atome de phosphore au sein du réseau du a-Si:H : (a) non dopante P_3^0 , (b) état donneur compensé par le défaut $\text{P}_4^+ + \text{Si}_3^-$, (c) atome neutre P_4^0	44
2.8	Evolution de la structure microcristalline en fonction du rapport de dilution d'hydrogène $R = [\text{H}_2]/[\text{SiH}_4]$	47
2.9	Représentation schématique du réseau atomique du silicium microcristallin hydrogéné ($\mu\text{c-Si:H}$)	48
3.1	Structure d'une cellule solaire à simple jonction à configuration superstrat ou p-i-n à base de : (a) a-Si:H (b) $\mu\text{c-Si:H}$	53
3.2	Structure d'une cellule solaire à simple jonction à configuration substrat ou n-i-p à base de : (a) a-Si:H (b) $\mu\text{c-Si:H}$	54
3.3	Diagramme de bande d'une cellule solaire : (a) PN à base de c-Si (b) simple jonction p-i-n à base de a-Si:H	58
3.4	Part du rayonnement diffusé (haze parameter) : (a) en transmission (b) en réflexion	59
3.5	Photos MEB d'une couche de ZnO:Al (a) avant gravure (b) après gravure par une solution d'acide chlorhydrique (0.5%)	61
3.6	Schéma montrant la dissociation du SiH_4 et du H_2 dans le plasma en différentes espèces chimiques	64
3.7	Schéma de surface-diffusion	64
3.8	Différentes réactions du radical SiH_3 en surface de la couche de a-Si:H en croissance	65
3.9	Schéma du système de dépôt par VHF GD PECVD	66
4.1	Fenêtre de présentation du logiciel AMPS-1D.	77
4.2	Interface utilisateur du logiciel AMPS-1D.	77
4.3	Boîte de dialogue des paramètres d'illumination et d'absorption.	78
4.4	Boîte de dialogue pour définir la structure à simuler et configurer les paramètres de ses différentes couches.	79

4.5	Boîte de dialogue de la configuration des paramètres des queues de bandes.	79
4.6	Boîte de dialogue de la configuration des paramètres des liaisons pendantes, les défauts midgap et les pièges discrets.	80
4.7	Fenêtre des résultats et du tracé des courbes de sortie.	81
4.8	Interface utilisateur du logiciel wxAMPS2.	82
4.9	Boîte de dialogue « Ambient » de l'interface de wxAMPS2.	83
4.10	Boîte de dialogue « Material » de l'interface de wxAMPS2.	83
4.11	Boîte de dialogue « Numeric Settings » de l'interface de wxAMPS2.	84
4.12	Boîte de dialogue « Results » de l'interface de wxAMPS2.	85
4.13	Illustration de l'environnement de travail du logiciel wxAMPS3.	87
4.14	Structure schématique de la cellule p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H simulée en conditions d'illumination AM1.5G à l'aide de l'AMPS-1D.	89
4.15	Taux de recombinaison en conditions de circuit ouvert ($V=V_{co}$) à différentes valeurs de gap de la couche active E_g de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H simulée en condition d'illumination AM1.5G avec l'AMPS-1D.	90
4.16	Effet du gap de mobilité de la couche active de la cellule p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H sur : (a) le champ électrique et (b) le diagramme de bandes.	91
4.17	Diagramme de bandes d'une cellule solaire p-i-n à base de a-Si:H simulée en conditions d'illumination AM1.5G à l'aide de l'AMPS-1D.	91
4.18	Structure schématique de la cellule simple p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H avec une interface défectueuse « defect p-i » simulée en conditions d'illumination AM1.5G à l'aide de l'AMPS-1D.	93
4.19	Taux de recombinaison en conditions de circuit ouvert ($V=V_{co}$) de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H avec et sans interface « defect p-i » simulée en conditions d'illumination à l'aide de l'AMPS-1D.	94
4.20	Représentation du champ électrique (a) et du diagramme de bandes (b) de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H avec et sans interface « defect p-i » simulée en conditions d'illumination AM1.5G à l'aide de l'AMPS-1D.	94
4.21	Structure de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H avec une couche buffer i-a-SiC:H à l'interface p-i simulée en conditions d'illumination AM1.5G à l'aide de l'AMPS-1D.	96

4.22	Taux de recombinaison en conditions de circuit ouvert ($V=V_{co}$) de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H avec et sans couche buffer simulée en conditions d'illumination AM1.5G à l'aide de l'AMPS-1D.	96
4.23	Représentation du champ électrique (a) et du diagramme de bandes (b) de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H avec et sans couche buffer simulée en conditions d'illumination AM1.5G à l'aide de l'AMPS-1D.	97
4.24	Représentation de la densité des porteurs trous de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H avec et sans couche buffer simulée en conditions d'illumination AM1.5G à l'aide de l'AMPS-1D.	97
4.25	Caractéristiques $J(V)$ de la cellule p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H en conditions d'illumination AM1.5G simulée à l'aide l'AMPS-1D.	98
4.26	Paramètres $J(V)$ de la cellule p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H pour différentes épaisseurs de la couche active.	99
4.27	Rendement quantique de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H simulée en conditions de court-circuit ($V=0$) et d'illumination AM1.5G à l'aide de l'AMPS-1D.	99
4.28	Structure schématique de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de μ c-Si:H simulée en conditions d'illumination AM1.5G à l'aide l'AMPS-1D.	101
4.29	Caractéristiques $J(V)$ de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de μ c-Si:H simulée en conditions d'illumination AM1.5G à l'aide de l'AMPS-1D.	101
4.30	Paramètres $J(V)$ de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de μ c-Si:H pour différentes épaisseurs de la couche active.	102
4.31	Rendement quantique de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de μ c-Si:H en conditions de court-circuit ($V=0$) et d'illumination AM1.5G pour différentes épaisseurs de couche active.	103
4.32	Schéma illustrant le principe d'une multijonction	104
4.33	Diagramme de bandes d'une jonction tunnel (TRJ) d'une cellule solaire à structure multijonction	105
4.34	Structure schématique de la tandem micromorphe a-Si:H/ μ c-Si:H avec une TRJ artificielle.	106
4.35	Caractéristique $J(V)$ de la cellule tandem micromorphe en conditions d'illumination AM1.5G simulée à l'aide de l'AMPS-1D.	107

4.36	Comparaison entre les caractéristiques des cellules tandem micromorphe, p-i-n à base de a-Si:H ($d_i=200$ nm) et p-i-n à base de μ c-Si:H ($d_i=2$ μ m).	108
4.37	Représentation du diagramme de bandes (a) et du champ électrique (b) de la tandem micromorphe simulée en condition d'illumination AM1.5G à l'aide de l'AMPS-1D.	109
4.38	Rendement quantique de la cellule tandem micromorphe simulée en conditions d'illumination AM1.5G et de court-circuit ($V=0V$) à l'aide de l'AMPS-1D.	109
4.39	Structure schématique de la tandem micromorphe a-Si:H/ μ c-Si:H simulée en conditions d'illumination AM1.5G à l'aide des logiciels wxAMPS.	110
4.40	Caractéristiques $J(V)$ de la cellule tandem micromorphe en condition d'illumination AM1.5G issues de l'analyse de sous cellules à l'aide du wxAMPS3 (a) et de la simulation à l'aide du wxAMPS2 (b).	111
4.41	Caractéristiques $J(V)$ de la cellule tandem micromorphe optimisée en condition d'illumination AM1.5G issues de l'analyse de sous cellules sous wxAMPS3 (a) et de la simulation à l'aide du wxAMPS2 (b).	112
4.42	Courbes de rendements quantiques des sous-cellules inférieure et supérieure de la cellule tandem micromorphe, issues de l'analyse des sous-cellules en conditions d'illumination AM1.5G et de court-circuit ($V = 0V$) à l'aide du wxAMP3.	113
4.43	Représentation du diagramme de bandes (a) et du champ électrique (b) de la cellule tandem micromorphe simulée à l'aide du wxAMPS2.	113
4.44	Courbes de taux de recombinaison et de génération de la cellule tandem micromorphe en condition d'illumination AM1.5G simulée à l'aide du wxAMPS2.	114
4.45	Structure schématique d'une cellule solaire triple-jonction a-Si:H/ μ c-Si:H/ μ c-Si:H simulée en conditions d'illumination à l'aide des logiciels wxAMPS.	115
4.46	Caractéristiques $J(V)$ de la cellule triple-jonction en condition d'illumination AM1.5G issues : (a) de l'analyse de sous cellules sous wxAMPS3 et (b) de la simulation à l'aide de wxAMPS2.	116
4.47	Courbes de rendement quantique des sous-cellules supérieure, du milieu et inférieure, respectivement de la cellule triple-jonction en conditions d'illumination AM1.5G et de court-circuit ($V=0V$) obtenues à partir de l'analyse de sous-cellules sous wxAMPS3.	117
4.48	Représentation du diagramme de bandes (a) et du champ électrique (b) de la cellule triple-jonction simulée à l'aide du wxAMPS2.	118

4.49	Courbes de taux de génération et de recombinaison en conditions d'illumination AM1.5G de la triple-jonction simulée à l'aide du wxAMPS2. . .	118
A.1	Exemple de représentation de pièges discrets de type donneur et de type accepteur localisés dans la bande interdite du a-Si:H	140
A.2	Représentation en forme de V de la densité d'états localisée dans la bande interdite du a-Si:H	141
A.3	Représentation en forme de U de la densité d'états localisée dans la bande interdite du a-Si:H	142
A.4	Représentation des distributions de types gaussiennes des états profonds localisés dans la bande interdite du a-Si:H	143

Liste des tableaux

2.1	Gap optique des alliages amorphes a-SiGe:H et a-SiC:H	42
3.1	Gaz utilisés dans le système de dépôt par PECVD-VHF	67
4.1	Paramètres de sortie de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H pour différentes valeurs de gap de mobilité de la couche active.	89
4.2	Comparaison entre les paramètres de sortie de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H avec et sans l'interface « defect p-i ».	93
4.3	Comparaison entre les paramètres de sortie de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H avec et sans couche buffer à l'interface p-i.	95
4.4	Performances de la cellule tandem micromorphe avant et après optimisation en utilisant les logiciels wxAMPS.	111
4.5	Comparaison entre les performances de la cellule tandem micromorphe et de la triple-jonction.	116
4.6	Performances des cellules solaires à simple jonction en a-Si:H, à simple jonction en $\mu\text{c-Si:H}$, tandem micromorphe a-Si:H/ $\mu\text{c-Si:H}$ et triple-jonction a-Si:H/ $\mu\text{c-Si:H}$ / $\mu\text{c-Si:H}$ à configuration superstrat.	121
A.1	Paramètres des différents défauts de la bande interdite du a-Si:H utilisés dans AMPS-1D.	144
A.2	Paramètres généraux des couches de a-Si:H et de $\mu\text{c-Si:H}$ utilisés dans AMPS-1D et wxAMPS2(3).	145
A.3	Paramètres des défauts des couches de a-Si:H et de $\mu\text{c-Si:H}$ utilisés dans AMPS-1D, wxAMPS2 et wxAMPS3.	146
A.4	Paramètres des contacts utilisés dans AMPS-1D et wxAMPS.	147

Liste des abréviations

AM	Air-Mass
AMPS-1D	Analysis of Microelectronic and Photonic Structures-one Dimension
AZO	Aluminium-doped Zinc Oxide
CAT-CVD	Catalytic-Chemical Vapor Deposition
CVD	Chemical Vapor Deposition
DOS	Density Of State
FTO	Fluorine-doped Tin Oxide
GUI	Graphical User Interface
HWCVD	Hot Wire Chemical Vapor Deposition
ITO	Indium Tin Oxide
MEB	Microscope Electronique à Balayage
MFC	Microsoft Foundation Classes
MPP	Maximal Power Point
PECVD	Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition
PV	Photovoltaïque
PVD	Physical Vapor Deposition
RAC	Réseau Aléatoire Continu
RPE	Résonance Paramagnétique Electronique
STC	Standard Test Conditions
SWE	Staëbler Wronski Effect

TAT	Trap Assisted Tunneling
TCO	Transparent Conductive Oxide
TRJ	Tunnel Recombination Junction
VHF-GD	Very High Frequency-Glow Discharge
VHF-PECVD	Very High Frequency-Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition
ZCE	Zone de Charge d'Espace

Introduction générale

La production d'électricité est essentiellement basée sur la combustion de ressources fossiles (pétrole, gaz naturel et charbon). Ces dernières représentent 80 % de la consommation d'énergie mondiale et selon l'Agence Internationale de l'Energie (AIE), celle-ci pourrait augmenter de 45 % d'ici à 2030 [1]. Cependant, ces ressources fossiles représentent une source importante d'émission de gaz à effet de serre qui contribue fortement au réchauffement climatique. D'autre part, leurs réserves sont limitées pour pouvoir satisfaire aux besoins croissants en énergie de la population mondiale [2]. Outre cette limitation, elles sont réparties inégalement dans le monde, ce qui crée des tensions et des conflits géopolitiques [3]. Pour toutes ces raisons, la communauté internationale a recours aux énergies alternatives considérées comme l'avenir énergétique des sociétés modernes. Il s'agit notamment des énergies renouvelables et durables qui sont issues d'énergies naturelles pratiquement inépuisables (le soleil, le vent, l'eau, la biomasse ou la géothermie) et plus respectueuses de l'environnement [4].

Parmi celles-ci, l'énergie solaire photovoltaïque (PV) qui est la conversion directe du rayonnement solaire en électricité à partir de cellules photovoltaïques basées sur les matériaux semiconducteurs. La recherche dans ce domaine a débuté dans les années cinquante. Aujourd'hui, il connaît un fort développement à l'échelle mondiale [5]. La technologie photovoltaïque la mieux établie sur le plan industriel est celle des cellules solaires à base de silicium cristallin (c-Si) dite de première génération. Elle représente aujourd'hui 90 % du marché solaire et offre les meilleurs rendements de conversion photovoltaïque. Toutefois, la filière silicium reste limitée par son coût élevé du au procédé de fabrication à haut budget thermique [6].

De ce fait, la recherche explore des voies alternatives à celle du photovoltaïque à base de silicium cristallin. L'objectif étant de développer des cellules solaires à moindre coût et à haut rendement de conversion [7]. Il existe aujourd'hui plusieurs filières photovoltaïques et parmi celles-ci la filière des cellules solaires en couches minces, ou thin-film qui représente la deuxième génération de cellules solaires.

Les principales cellules solaires en couches minces qui se partagent le marché sont notamment à base de silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H), de tellure de Cadmium (CdTe) ou de séléniures de Cuivre, d'Indium et de Gallium (CuInGaSe₂ ou CIGS) [8]. Ces matériaux possèdent un fort coefficient d'absorption si bien qu'une épaisseur de quelques micromètres suffit à absorber le spectre solaire, d'où une réduction de matière première [7].

Ce travail de thèse présenté dans ce manuscrit traite en particulier les cellules solaires en technologie en couches minces à base a-Si:H. Dans cette technologie, grâce aux procédés de fabrication à basse température, des substrats à bas coûts (verre, métal, plastique) peuvent être utilisés sans risque d'altération. En outre, le dépôt des cellules solaires peut se faire sur des grandes surfaces. Tout cela contribue davantage à réduire le coût des cellules solaires et par conséquent le a-Si:H est considéré comme un candidat prometteur pour une technologie des cellules solaires en couches minces à bas coût [9]. Cependant, les rendements de conversion sont plus faibles comparés au c-Si et diminuent suite à une dégradation induite par la lumière. Cette dégradation est due au phénomène appelé Effet Staëbler-Wronski inhérent au matériau de a-Si:H [10]. De nombreuses recherches sont ainsi menées pour développer des solutions visant à améliorer la valeur et la stabilité des rendements de conversion des cellules solaires en couches minces de silicium. Parmi ces solutions, l'utilisation des structures solaires à multijonction [9]. L'objectif de notre travail est de simuler et d'optimiser les cellules solaires en couches minces à base de silicium amorphe hydrogéné à simple jonction et multijonction afin d'en améliorer les performances photovoltaïques.

Ce manuscrit s'organise de la façon suivante :

- ◆ Le premier chapitre rappelle les principes de base de la conversion photovoltaïque. On retracera d'abord l'histoire du PV, puis seront présentées les différentes filières photovoltaïques. Les notions liées au rayonnement solaire et l'effet photoélectrique seront également abordées. Nous rappellerons ensuite le principe de fonctionnement d'une cellule solaire à jonction PN sous illumination ainsi que le processus d'absorption dans les matériaux. Nous expliquerons les différents mécanismes de recombinaisons pouvant avoir lieu dans les matériaux semiconducteurs. Enfin, nous définirons les notions de réponse spectrale et de rendement quantique des cellules solaires.
- ◆ Le deuxième chapitre est consacré à l'étude des propriétés électriques et optiques du a-Si:H et celles du silicium microcristallin hydrogéné (μ c-Si:H).
- ◆ Le troisième chapitre est destiné à la description de l'architecture de base des cellules solaires à base de silicium amorphe hydrogéné et du silicium microcristallin hydrogéné. Ensuite, nous décrirons quelques procédés de dépôts des

différents matériaux constituant les cellules solaires en couches minces de silicium amorphe hydrogéné.

- ◆ Le quatrième chapitre est destiné à répondre à la problématique de ce travail de thèse concernant l'optimisation des cellules solaires en couches minces de silicium amorphe hydrogéné pour l'obtention des rendements de conversion élevés. Tout d'abord sera présenté le concept de modélisation numérique suivi de la description des logiciels de simulation utilisés dans cette thèse à savoir l'AMPS-1D et ses mises à jour wxAMPS2 et wxAMPS3. Ensuite, nous procéderons à la simulation et l'optimisation des cellules solaires en couches minces de silicium amorphe hydrogéné à simple jonction. Nous montrerons que celles-ci possèdent des rendements limités et que pour s'affranchir de cette limitation, il faudrait passer à des structures solaires à multijonction permettant de couvrir un spectre plus large du rayonnement solaire et du coup d'améliorer les performances photovoltaïques. Nous verrons comment optimiser une cellule tandem micromorphe et une cellule triple-jonction pour obtenir les meilleurs rendements de conversion.

Ce travail de thèse s'achève par une conclusion générale. A la fin du manuscrit, une annexe fournit une description des différents défauts de la bande interdite du a-Si:H et les paramètres de simulation utilisés.

Chapitre 1

Les principes de la conversion photovoltaïque

Ce premier chapitre présente les généralités et les principes de base de la conversion photovoltaïque qui nous permettront de mieux appréhender la suite de l'étude. D'abord, l'histoire du photovoltaïque est succinctement retracée puis les différentes générations de cellules solaires seront passées en revue. Nous décrirons le principe de fonctionnement de la cellule solaire conventionnelle PN sous illumination et cela après avoir abordé les notions se rapportant au rayonnement solaire et à l'effet photoélectrique. Nous aborderons également le processus d'absorption et les différents mécanismes de recombinaison dans les matériaux semiconducteurs. Enfin, nous parlerons de la réponse spectrale et du rendement quantique d'une cellule solaire.

1.1 L'histoire du photovoltaïque

Le terme photovoltaïque (PV) est issu du mot grec « phos » qui signifie lumière et du nom du physicien Italien Alessandro Volta, auquel la tension électrique lui doit aussi son unité « Volt ». Il désigne le processus de conversion directe de l'énergie solaire en énergie électrique. Ce processus repose sur l'effet photovoltaïque qui fût observé pour la première fois par le physicien français Alexandre Edmond Becquerel en 1839. Ce n'est que bien plus tard en 1883, que Charles Fritts réalisa la première cellule solaire en illuminant un cristal de sélénium (Se) recouvert d'une fine couche d'or (Au). Ce dispositif pouvait afficher un rendement de conversion de l'ordre de 1 à 2%. Il faudra attendre l'année 1954 pour qu'une équipe de chercheurs des laboratoires Bell parvienne à mettre au point la première cellule solaire à jonction pn à base de silicium dont le rendement était d'environ 6% [11]. Cinq ans plus tard, les premières cellules solaires équipèrent le premier satellite américain, Vanguard1, mis

en orbite dans l'espace. Depuis, de nombreux progrès ont été réalisés dans le domaine du photovoltaïque surtout motivés par la conquête de l'espace. Cependant, le coût très élevé des cellules solaires à cette époque a fait que leur usage soit cantonné au domaine spatial [12].

Les premières applications terrestres des cellules photovoltaïques ont été développées au milieu des années 70, environ 15 ans après l'industrie spatiale. Mais le photovoltaïque terrestre ne connaîtra un véritable engouement qu'à la suite du premier choc pétrolier de 1973 et devant le coût croissant des énergies fossiles [13]. D'autre part, les préoccupations écologiques liées à l'utilisation des énergies fossiles ont amené les gouvernements à attribuer des subventions pour encourager à investir dans l'énergie solaire. Dès lors, l'industrie du photovoltaïque va connaître une forte croissance [14].

1.2 Les différentes générations des cellules solaires

Les cellules solaires, appelées aussi cellules photovoltaïques ou photopiles, sont des dispositifs en grande partie à base de matériaux semiconducteurs. Les technologies de cellules solaires se sont succédé au fil du temps, si bien qu'on parle aujourd'hui de technologies de première, seconde et troisième génération.

1.2.1 Cellules solaires de première génération

Ce sont les cellules solaires issues de la technologie du silicium cristallin (c-Si) à savoir les cellules au silicium monocristallin et polycristallin (ou multicristallin). Ces deux filières dominent largement le marché mondial du photovoltaïque (91%) avec des modules commerciaux atteignant des rendements de 15% pour le monocristallin et 12% pour le polycristallin [15]. En laboratoire, les meilleurs rendements pour le monocristallin et le polycristallin sont de 25% et 20,8% respectivement [16]. La première génération de cellules solaires utilise des matériaux de haute pureté caractérisés par une très faible quantité de défauts. Il s'agit de la génération de cellules solaires qui enregistre les meilleurs rendements de conversion. Cependant, leur fabrication requiert une grande quantité de matière première hautement purifiée et un budget thermique élevé. Du coup, leur prix de revient est assez élevé et reste un frein à leur production et à leur diffusion à grande échelle.

1.2.2 Cellules solaires de seconde génération

La deuxième génération regroupe les technologies dites couches minces (Thin-Film en anglais) qui se subdivisent en trois grandes catégories :

1. Les cellules basées sur le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) mises au point pour la première fois en 1976 par Carlson et Wronski [10]. Cette filière représente actuellement 5% de la production et les rendements des cellules sont de l'ordre de 5 à 10% [17]. En laboratoire, ces cellules affichent un rendement de 13,6% [16]. Du fait de son fort coefficient d'absorption dans le visible et son gap direct qui permet un processus d'absorption plus efficace [18], le a-Si:H permet de réaliser des cellules solaires en technologie couches minces. Ces dernières sont déposées à partir de procédés à basse température comme le dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma (PECVD) ou par résistance chauffante (HWCVD) [19].
2. Les cellules basées sur le tellure de cadmium (CdTe) dont l'utilisation est controversée du fait de sa toxicité. Ces cellules atteignent des rendements de 21,5% en laboratoire [16] et de 10% à 14% en production industrielle.
3. Les cellules basées sur des diséléniures de cuivre et d'indium (famille des chalcopyrites) qui sont des alliages du type $\text{Cu}(\text{In},\text{Ga})\text{Se}_2$ noté CIGS ou CIS. Cette filière a beaucoup progressé pour atteindre des rendements de 21,7% en laboratoire [16]. Les modules commerciaux présentent des rendements de 10% à 13% [17].

Les cellules de seconde génération présentent des coûts de production plus faibles que celles issues de la première génération. Les procédés de fabrication utilisés sont à faible budget thermique et à consommation réduite de matière première. La part de marché de la technologie des cellules en couches minces est autour de 20%.

1.2.3 Cellules solaires de troisième génération

Elles se basent sur les matériaux organiques comme les polymères et les molécules semiconductrices. Le dépôt de ces matériaux peut se faire à basse température, en voie liquide et sur des substrats flexibles. La fabrication des cellules organiques implique un faible coût énergétique et un faible impact environnemental. Toutefois, ces technologies n'ont pas encore atteint une longévité et une efficacité suffisantes en vue d'applications commerciales à grande échelle [20].

La Figure 1.1 montre le dernier bilan multifilières des rendements records édité par le National Renewable Energy laboratory (NREL, USA) en Août 2015, qui illustre aussi les progrès réalisés ces dernières années.

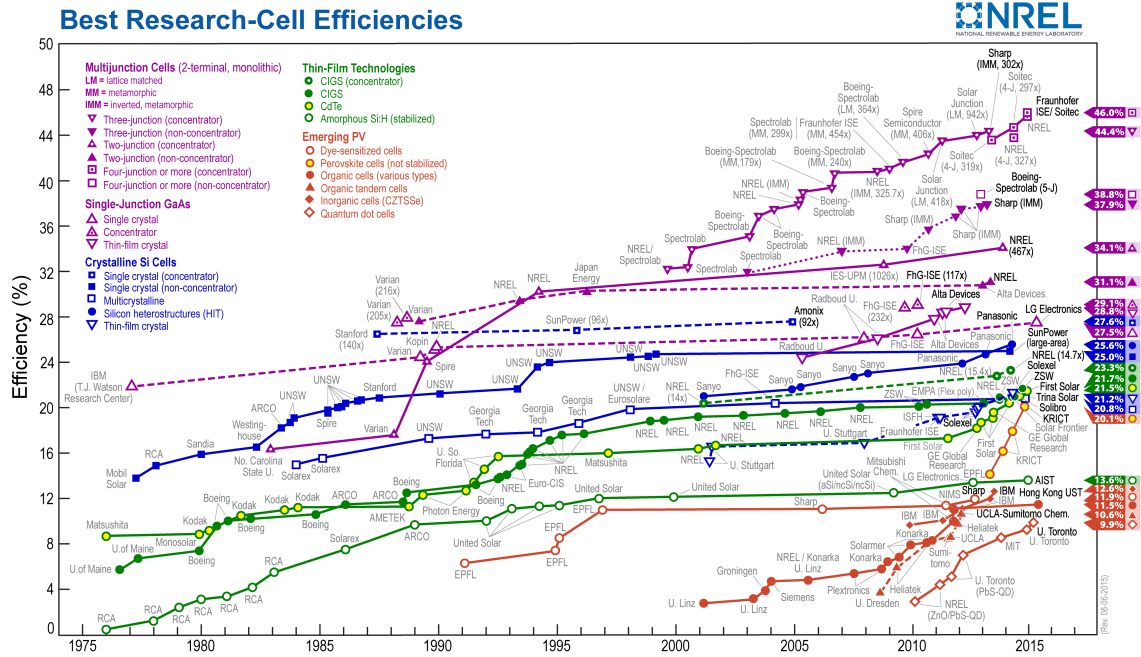


Figure 1.1 – Graphe de la société NREL (National Renewable Energy laboratory) montrant l'évolution des rendements produits en laboratoires, toutes filières confondues, depuis 1975 [16].

1.3 Notions préliminaires sur le rayonnement solaire

Le soleil est la source de l'énergie photovoltaïque. Cet astre est un gigantesque réacteur à fusion nucléaire qui libère une énergie considérable par un processus de transformation d'hydrogène en hélium. Cette énergie voyage à travers l'espace sous forme de radiations ou d'ondes électromagnétiques à la vitesse de $300\,000\text{ km} \cdot \text{s}^{-1}$ correspondant à la vitesse de la lumière. L'ensemble de ces radiations constitue le rayonnement solaire caractérisé par son spectre et son irradiane. Le spectre solaire est la répartition spectrale du rayonnement électromagnétique en fonction de la longueur d'onde λ , ou de manière équivalente, de sa fréquence ν [21]. L'irradiane désigne la quantité d'énergie du rayonnement solaire perçue par unité de surface au niveau de l'atmosphère ou du sol. Elle s'exprime en $\text{W} \cdot \text{m}^{-2}$.

Après avoir parcouru une distance d'environ 150 millions de kilomètres, le rayonnement solaire arrive à l'extérieur de l'atmosphère avec une irradiane d'environ $1367\text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$ connue sous le nom de constante solaire C_s . Cependant, lors de sa traversée dans l'atmosphère terrestre, le rayonnement solaire subit une atténuation en raison des phénomènes d'absorption et de diffusion engendrés par les différents constituants atmosphériques. Le rayonnement solaire global atteignant la surface du sol comporte essentiellement deux composantes [22] :

- **Le rayonnement direct** : qui est le rayonnement solaire intercepté à la surface de la terre et en provenance direct du soleil sans avoir rencontré un quelconque obstacle sur sa trajectoire ;
- **Le rayonnement diffus** : qui résulte de la dispersion du rayonnement solaire par les entités atmosphériques comme les nuages et les particules de poussière. Il n'a pas de direction privilégiée.

L'atténuation du rayonnement solaire varie en fonction de la longueur du parcours emprunté par celui-ci pour arriver au niveau du sol. Cette longueur est fonction de la position du soleil par rapport au zénith et s'exprime en termes de masse d'air ou AM (de l'anglais : Air-Mass). Son expression est donnée par l'équation (1.1).

$$AM = \frac{1}{\cos \theta} \quad (1.1)$$

où l'angle θ correspond à l'angle zénithal qui est l'angle formé par la verticale avec la ligne reliant l'observateur au soleil comme illustré à la Figure 1.2a. Le coefficient Air-Mass évalue la masse atmosphérique traversée par le rayonnement solaire. Quand le soleil est situé au zénith du lieu d'observation, c'est-à-dire quand $\theta=0^\circ$ AM vaut 1. On parle alors de spectre AM1 qui correspond à la situation pour laquelle le rayonnement solaire traverse la plus petite masse atmosphérique et subit par conséquent le minimum d'atténuation. Pour les applications terrestres et notamment dans le domaine du photovoltaïque, le spectre standard AM1.5G a été défini, G signifie global, pour un angle zénithal de $48,2^\circ$. Il correspond à une irradiance de $970 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$ arrondie à la valeur de $1000 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$ qui est appelée 1 sun (unité de radiation). Du fait qu'il ne traverse aucune masse d'air, le spectre hors atmosphère est désigné par AM0 (Air Mass zero) et concerne les applications spatiales. Les spectres d'irradiance AM0 et AM1.5G sont représentés à la Figure 1.2b [23].

Le spectre solaire AM0 est comparable à celui d'un corps noir à 5800 K. Il comporte une gamme de longueur d'onde plus grande comparé aux spectres sur terre. Il forme un spectre continu allant de l'ultraviolet à l'infrarouge en passant par le visible avec les proportions suivantes [24] :

- 9 % d'ultraviolet (UV) qui s'étend de $0,01 \mu\text{m}$ à $0,4 \mu\text{m}$;
- 42 % de visible qui s'étend de $0,4 \mu\text{m}$ à $0,75 \mu\text{m}$. Cette partie du spectre correspond à la lumière ;
- 49 % d'infrarouge (IR) qui s'étend de $0,75 \mu\text{m}$ à 1 mm. Ce domaine spectrale est divisé en trois régions à savoir le proche infrarouge (de $0,75 \mu\text{m}$ à $2,5 \mu\text{m}$), l'infrarouge moyen (de $2,5 \mu\text{m}$ à $50 \mu\text{m}$) et l'infrarouge lointain (de $50 \mu\text{m}$ à 1 mm).

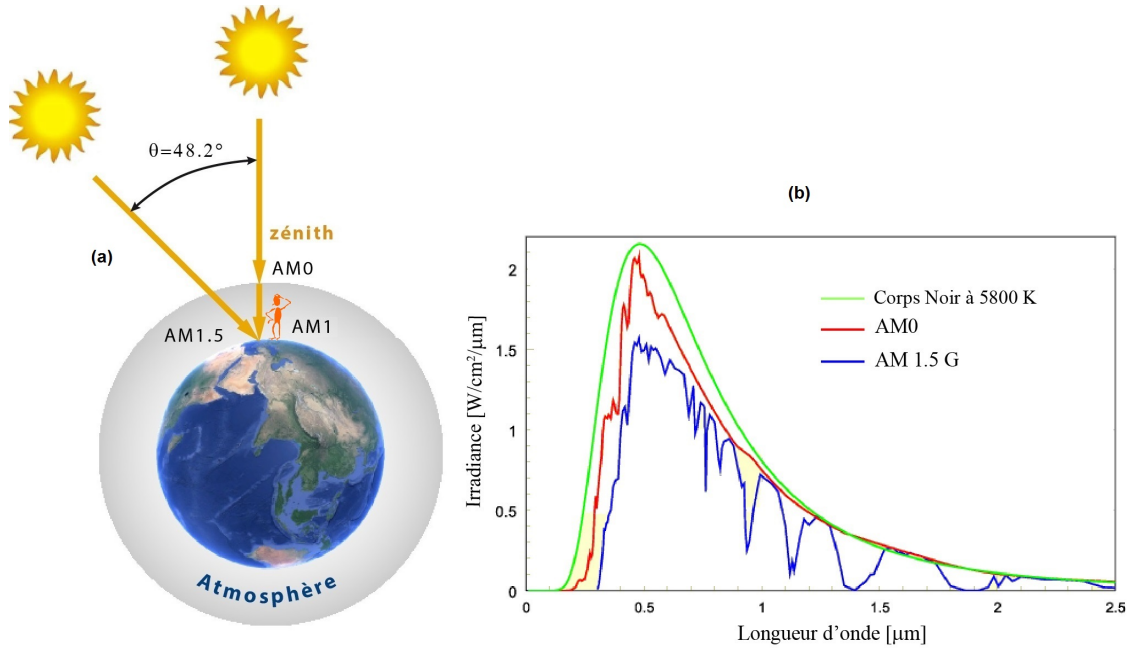


Figure 1.2 – (a) Définition du coefficient Air-mass et (b) Spectre d'irradiance où AM0 est le spectre solaire hors atmosphère et AM1.5G le spectre solaire après traversée de l'atmosphère défini pour un angle zénithal de $48,2^\circ$.

En raison du processus d'atténuation, le spectre AM1.5G est très érodé par rapport au spectre solaire hors atmosphère. Les creux correspondent aux principales bandes d'absorption. On observe très peu de rayons UV parvenant au sol. Ce spectre s'étend jusqu'aux grandes longueurs d'ondes via les infrarouges pour finalement s'éteindre aux alentours des $2,5 \mu\text{m}$.

Dans le domaine du photovoltaïque, des conditions standards de test notées STC (Standard Test Conditions en anglais) sont définies pour pouvoir caractériser et comparer les performances des cellules solaires. Il s'agit du spectre de référence AM1.5G pour une irradiance $1000 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$ et une température de 25°C [23].

1.4 L'effet photoélectrique

On ne peut expliquer l'effet photovoltaïque sans évoquer l'effet photoélectrique mis en évidence par le physicien Hertz en 1887 [25]. L'effet photoélectrique correspond à une interaction du rayonnement électromagnétique avec la matière. Dans les conducteurs, il se traduit par une émission d'électrons tandis que dans les semi-conducteurs, les électrons sont excités de la bande de valence vers la bande de conduction.

C'est en 1905 qu'Einstein proposa d'appliquer la théorie des quanta de Planck au rayonnement électromagnétique pour interpréter l'effet photoélectrique. Il considère qu'une radiation électromagnétique est constituée de corpuscules appelés photons (ou quanta d'énergie) qui interagissent avec les électrons de la matière. Ainsi, il met en évidence le comportement corpusculaire du rayonnement électromagnétique en plus de son aspect ondulatoire établi par Maxwell. Ce double comportement est désigné par l'expression de dualité onde-corpuscule. Cette découverte valut à Einstein le prix de Nobel en 1921.

Selon Einstein, chaque photon est caractérisé par son énergie E liée à la fréquence de radiation par la relation [26] :

$$E_{\text{photon}} = h\nu \quad (1.2)$$

où h est la constante de Planck avec $h=6,63 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ et ν la fréquence de l'onde électromagnétique qui s'exprime en hertz (Hz).

En termes de longueur d'ondes, cette relation peut s'écrire :

$$E_{\text{photon}} = \frac{hc}{\lambda} \quad (1.3)$$

où c est la célérité de la lumière et λ la longueur d'onde électromagnétique.

Chaque photon porte une énergie inversement proportionnelle à sa longueur d'onde λ . Ainsi, plus la longueur d'onde du photon est courte, plus son énergie est élevée.

1.4.1 L'effet photoélectrique dans les matériaux conducteurs

Quand un photon entre en collision avec un électron dans un matériau conducteur comme dans le cas d'un métal, il cède toute son énergie à cet électron qui est alors éjecté de la structure. C'est l'effet photoélectrique. L'électron éjecté est appelé photoélectron. Cette photoémission ne se produit que si l'énergie du photon est au moins égale au travail d'extraction (ou travail de sortie) du métal noté « ϕ_s ».

Si l'énergie du photon est égale au travail d'extraction, alors :

$$h\nu = \phi_s \quad (1.4)$$

Cette énergie suffit juste à extraire l'électron hors du métal avec une énergie cinétique nulle. Dans ce cas, la fréquence correspondante représente la fréquence minimale qui permet d'éjecter les électrons de la surface du métal. Cette fréquence

est appelée fréquence de seuil photoélectrique caractéristique du matériau et symbolisée par ν_0 .

$$\nu_0 = \frac{\phi_s}{h} \quad (1.5)$$

Si l'énergie du photon est supérieure au travail d'extraction, alors l'électron conserve l'excédent d'énergie sous forme d'énergie cinétique :

$$E_c = h\nu - \phi_s \quad (1.6)$$

D'autre part, quand on augmente l'intensité du rayonnement électromagnétique dont la fréquence est supérieure à la fréquence de seuil, c'est le nombre de photoélectrons émis qui augmente tandis que leur énergie reste inchangée.

1.4.2 L'effet photoélectrique dans les semiconducteurs

L'interaction des photons avec les semiconducteurs donne lieu à l'effet photoélectrique interne. L'absorption d'un photon incident dans le cristal se traduit par le passage d'un électron de la bande de valence à la bande de conduction. Il s'agit de transitions électroniques interbandes qui correspondent à la photogénération de paires électron-trou appelées aussi porteurs libres. Pour être absorbé, le photon doit posséder une énergie suffisante qui dépend de la largeur de la bande interdite du semiconducteur ainsi que du mode de transition de l'électron de la bande de valence à la bande de conduction [27].

1.4.2.1 Notions de gap direct et indirect

Dans l'espace réciproque, si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction coïncident pour la même valeur du vecteur d'onde k , alors le semiconducteur est à gap direct comme dans le cas de l'arséniure de gallium (GaAs). Si au contraire, ils correspondent à des valeurs de k différentes, alors le semiconducteur est à gap indirect. C'est la cas du silicium cristallin (Si) par exemple. La Figure 1.3 illustre cette notion de gap direct et indirect dans les semiconducteurs.

1.4.2.2 Transitions interbandes

Les transitions interbandes correspondent au passage d'électrons de la bande de valence à la bande de conduction suite à l'absorption de photons ayant une énergie

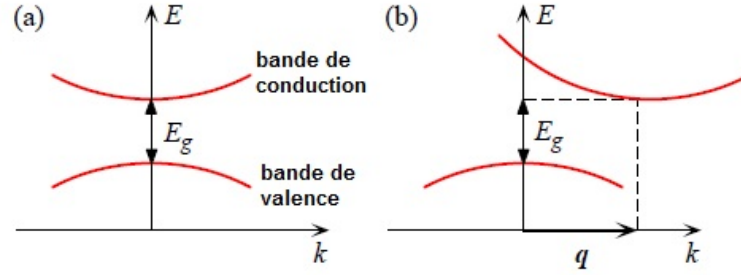


Figure 1.3 – Structure de bande schématique d'un semiconducteur à gap direct (a) et à gap indirect (b).

suffisante. Ce type de transitions peut être direct ou indirect selon qu'il s'agisse d'un semiconducteur à gap direct ou indirect.

- **Les transitions directes ou verticales** : ce type de transition se fait par l'absorption d'un photon incident dont l'énergie est reliée directement à la largeur de la bande interdite E_g du semiconducteur. Cette énergie doit être supérieure ou égale à E_g :

On a :

$$h\nu \geq E_g \quad (1.7)$$

Le seuil d'absorption apparaît à la fréquence :

$$\nu_0 = E_g/h \quad (1.8)$$

Lorsque l'énergie du photon est supérieure à la largeur de la bande interdite, l'excès d'énergie absorbée par l'électron est perdue sous forme de chaleur. C'est le processus de thermalisation qui est accompagnée par l'émission de phonons. La longueur d'onde susceptible de contribuer à la création de porteurs est donnée par :

$$\lambda \leq 1,24/E_g \quad (1.9)$$

- **Les transitions indirectes ou obliques** : ce type de transition se fait par l'absorption d'un photon incident avec la participation d'un phonon d'énergie $h\nu(q)$ et de vecteur d'onde q pour satisfaire à la condition de conservation de quantité de mouvement.

A basse température, où il y a peu de phonons dans le cristal, la transition ne peut avoir lieu que si l'énergie du photon est suffisante pour exciter un électron et créer un phonon.

$$h\nu = E_g + h\nu(q) \quad (1.10)$$

Le seuil d'absorption apparaît donc pour une fréquence :

$$\nu = \frac{E_g}{h} + \nu(q) \quad (1.11)$$

A plus haute température, un phonon du cristal peut participer à la transition, le seuil d'absorption est alors donné par :

$$\nu = \frac{E_g}{h} \pm \nu(q) \quad (1.12)$$

où le signe - correspond au cas où un phonon est annihilé lors de la transition.

Les photons non absorbés à cause de leur énergie inférieure au gap du semiconducteur et la thermalisation issue des photons énergétiques constituent des pertes optiques qui affectent le rendement d'une cellule solaire.

1.5 Cellule solaire à jonction PN à base de silicium cristallin

Les porteurs de charges photogénérés dans un semiconducteur doivent pouvoir être dissociés et être collectés. Pour ce faire, on a recourt à la jonction PN qui constitue le dispositif fondamental et de base de la conversion photovoltaïque. La Figure 1.4 représente une jonction PN sous illumination.

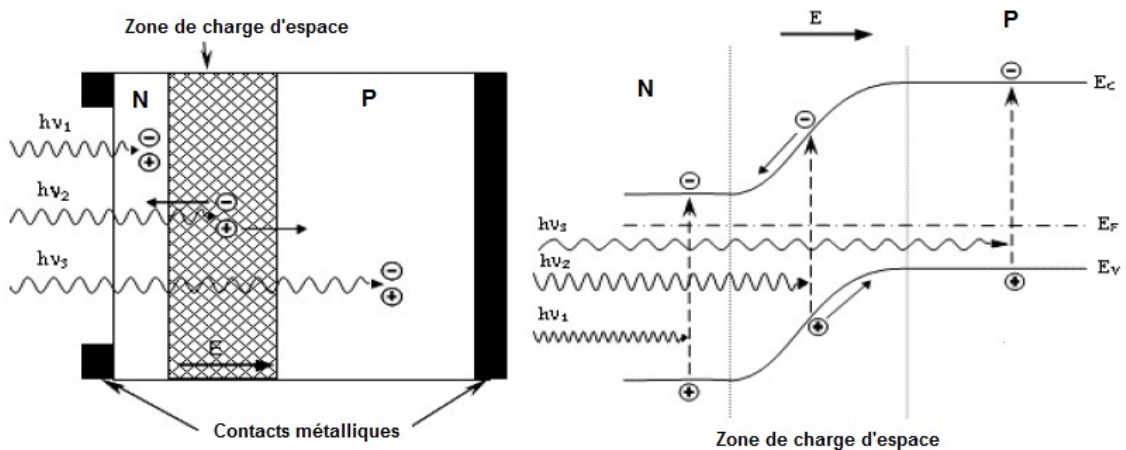


Figure 1.4 – Cellule solaire à jonction PN à base de silicium cristallin sous illumination.

1.5.1 Principe de fonctionnement

Les photons incidents dont l'énergie est suffisante seront absorbés au cours de leur propagation dans le dispositif. Cette absorption se traduit par la création de paires électron-trou dans les régions N et P et dans la zone de charge d'espace (ZCE). Cependant, les photoporteurs créés dans les différentes régions de la jonction PN n'ont pas le même comportement. En effet :

- Dans les régions neutres N et P, les porteurs minoritaires en excès, suite à un gradient de concentration, diffusent vers la zone de charge d'espace. La distance caractéristique sur laquelle les porteurs minoritaires peuvent diffuser avant de se recombiner représente la longueur de diffusion L_d . Elle est liée au coefficient de diffusion D et à la durée de vie moyenne τ des porteurs minoritaires par la relation :

$$L_d = \sqrt{D \tau} \quad (1.13)$$

Ainsi, les porteurs générés loin de la zone de charge d'espace situés à une distance supérieure à L_d seront perdus par recombinaison. Pour ceux qui parviennent à atteindre la jonction, ils seront happés par le champ électrique interne vers les régions où ils constituent des porteurs majoritaires. La diffusion des porteurs forment le photocourant de diffusion dans la jonction PN.

- Dans la zone de charge d'espace, les paires électron-trou créées sont aussitôt dissociées par le champ électrique interne qui règne dans cette région. La probabilité de collecte de ces porteurs est plus grande. Les électrons sont émis vers la région N et les trous vers la région P. Ces porteurs forment le photocourant de génération.

Les photocourants de diffusion et de génération vont s'ajouter pour donner le photocourant résultant « I_{ph} » qui correspond à un courant de minoritaires dont l'intensité est proportionnelle à l'éclairement.

Il en résulte de la dissociation des porteurs l'apparition d'un champ électrique de sens opposé au champ électrique interne de la zone de charge d'espace, ayant pour effet une diminution de la barrière de potentiel. L'illumination de la jonction se traduit ainsi par une polarisation directe de la jonction PN où se développe une phototension : c'est l'effet photovoltaïque. Toutefois, cette phototension ne peut excéder la valeur du potentiel de diffusion de la jonction PN [28].

1.5.2 Caractéristique I(V) sous illumination

Dans une cellule solaire sous illumination, il se crée deux courants de sens opposés, à savoir :

- un courant photogénéré I_{ph} du à l'éclairement de la cellule ;
- un courant d'obscurité I_{obs} qui circule dans la cellule en l'absence d'éclairement et qui est fonction de la tension appliquée.

Par conséquent, la cellule solaire sous illumination peut fournir à une charge un courant I tel que :

$$I(V) = I_{ph} - I_{obs}(V) \quad (1.14)$$

Dans le cas d'une cellule solaire à jonction PN idéale, l'équation (1.14) peut être exprimée sous la forme suivante :

$$I(V) = I_{ph} - I_0 \left(\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right) \quad (1.15)$$

où I_s est le courant de saturation de la diode, q est la charge élémentaire, k est la constante de Boltzmann et T est la température.

La Figure 1.5a représente la caractéristique courant-tension $I(V)$ sous illumination et à l'obscurité typique d'une cellule solaire à jonction PN. Par convention, on inverse l'axe des courants de la caractéristique $I(V)$, comme illustré à la Figure 1.5b, puisque la cellule solaire est considérée comme un générateur. La puissance délivrée par la cellule solaire est maximale pour un point de fonctionnement de la caractéristique appelé Point de Puissance Maximum ou MPP (Maximal Power Point en anglais) dont les coordonnées sont I_{max} et V_{max} .

Les performances d'une cellule solaire sont principalement évaluées à partir de la caractéristique $I(V)$ sous les conditions STC. Les principaux paramètres photovoltaïques sont :

- **Le rendement ou l'efficacité de conversion E_{ff}** : représente la grandeur principale utilisée pour caractériser les performances d'une cellule solaire.

C'est le rapport entre la puissance maximale et la puissance incidente :

$$E_{ff} = \frac{I_{max} V_{max}}{P_i} \quad (1.16)$$

où : P_i est la puissance du rayonnement incident dans les conditions STC, soit $1000 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$.

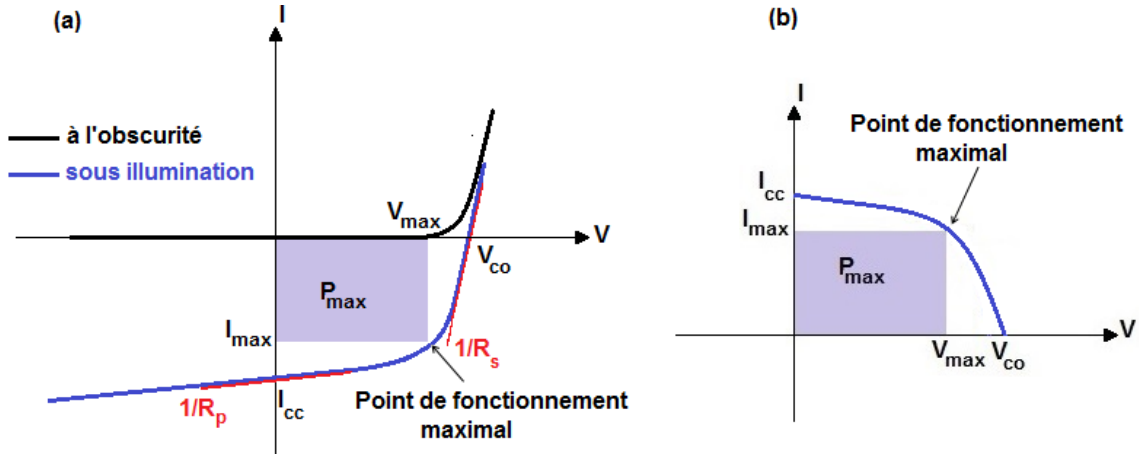


Figure 1.5 – (a) Caractéristiques courant-tension d'une cellule solaire à jonction PN sous illumination et à l'obscurité (b) Représentation conventionnelle de la courbe I(V).

- **Le courant de court-circuit I_{cc}** : est le courant débité par la cellule solaire pour une valeur nulle de la tension V . Il correspond au courant photogénéré I_{ph} . En général, on utilise la densité de courant J_{cc} ($\text{mA} \cdot \text{cm}^{-2}$) pour s'affranchir de l'aire de la cellule,.
- **La tension de circuit ouvert V_{co}** : est la tension mesurée pour une valeur nulle du courant I .
- **Le facteur de forme FF (ou facteur de remplissage)** : il renseigne sur le caractère rectangulaire de la courbe I(V). Son expression est donnée par l'équation :

$$FF = \frac{I_{max} V_{max}}{I_{cc} V_{co}} \quad (1.17)$$

Par ailleurs, il peut être aussi utile de connaître l'équivalent de ces paramètres en anglais : efficiency (E_{ff}), short-circuit density current (J_{sc}), open-circuit voltage (V_{oc}) et fill factor (FF).

En combinant les équations (1.16) et (1.17), le rendement de conversion peut être exprimé en fonction des paramètres J_{cc} , V_{co} et FF de la manière suivante :

$$E_{ff} = \frac{J_{cc} V_{co} FF}{P_i} \quad (1.18)$$

D'après l'équation (1.18), on constate que si l'on veut améliorer le rendement de conversion, il est nécessaire d'optimiser les cellules solaires afin d'améliorer la densité de courant J_{cc} et/ou la tension V_{co} .

1.5.3 Schéma électrique équivalent d'une cellule solaire

Les paramètres d'une cellule photovoltaïque réelle (V_{co} , I_{cc} , FF, E_{ff}) peuvent être affectés par des pertes résistives reflétées par deux résistances : une résistance série R_s et une résistance parallèle R_p . Ces deux résistances peuvent être extraites graphiquement à partir de la caractéristique $I(V)$ comme le montre la Figure 1.5a. Les pentes de la courbe $I(V)$ au point V_{co} et au point J_{cc} correspondent à l'inverse de la résistance série ($1/R_s$) et à l'inverse de la résistance parallèle ($1/R_p$), respectivement.

La résistance R_s rend compte des pertes ohmiques au sein du matériau, dans les contacts et les connexions. La résistance parallèle R_p ou de court-circuit (ou « shunt » en anglais) modélise les courants de fuite dans la cellule. La Figure 1.6 illustre l'effet de ces résistances sur la caractéristique $I(V)$ sous illumination. Les résistances R_s et R_p agissent principalement sur le facteur de forme FF sans affecter les autres paramètres. Cependant à partir d'une certaine valeur critique, les résistances R_s et R_p commencent à agir sur le courant I_{cc} et sur la tension V_{co} respectivement avant d'agir sur I_{cc} et V_{co} simultanément [29].

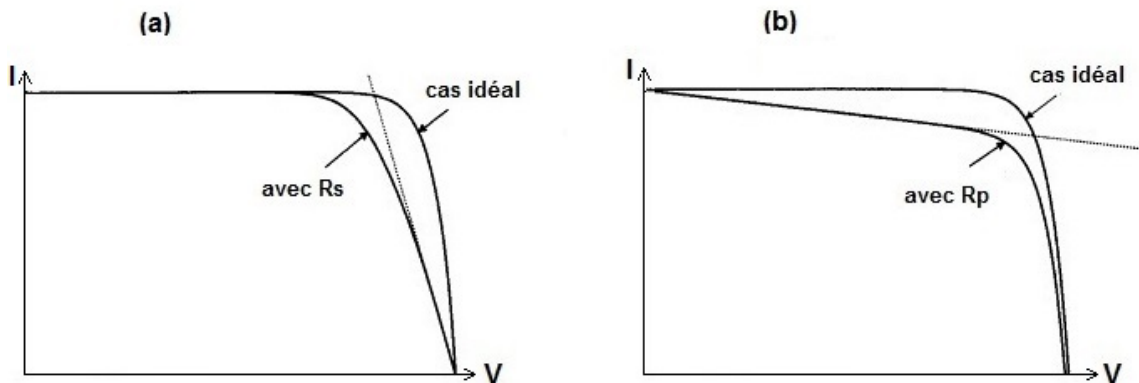


Figure 1.6 – Effet de la résistance série (a) et de la résistance parallèle (b) sur la caractéristique $I(V)$ sous illumination.

En tenant compte des pertes résistives, l'équation (1.15) devient :

$$I(V) = I_{ph} - I_0 \left(\exp \left(\frac{q(V - IR_s)}{nkT} \right) - 1 \right) - \frac{V - IR_s}{R_p} \quad (1.19)$$

où n est le facteur d'idéalité qui caractérise le caractère réel de la cellule solaire, avec :

- $n=1$ lorsque le courant de la diode est dominé par les courants de diffusion des porteurs minoritaires dans les zones neutres.
- $n=2$ lorsque le courant de la diode est dominé par les recombinaisons dans la zone de charge d'espace.

La cellule peut être ainsi modélisée par le schéma électrique de la Figure 1.7. La source de courant modélise le courant photogénéré I_{ph} .

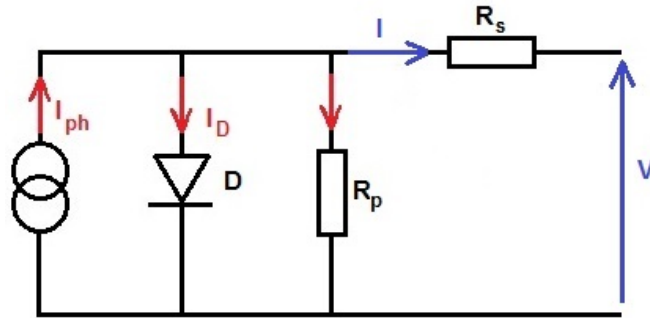


Figure 1.7 – Schéma électrique équivalent d'une cellule solaire à jonction PN.

1.6 Le processus d'absorption

La probabilité d'absorption d'un photon dans un matériau est régit par le coefficient d'absorption α dont l'expression est donnée par l'équation (1.20).

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (1.20)$$

où k est le coefficient d'extinction.

Le coefficient α est fonction de la longueur d'onde λ du photon.

L'absorption du rayonnement solaire lors de sa propagation dans un matériau est décrite par la loi de Beer-Lambert, aussi connue comme la loi de Beer-Lambert-Bouguer, selon laquelle l'intensité du rayonnement à une profondeur x du matériau s'écrit :

$$I(x) = I_0 \exp(-\alpha x) \quad (1.21)$$

où I_0 est l'intensité du rayonnement incident (en $x=0$).

Les photons les plus énergétiques sont absorbés en quasi-totalité près de la surface éclairée. Quant aux photons les moins énergétiques, ils sont soit absorbés plus en profondeur dans le matériau, soit transmis vers l'extérieur.

1.7 Mécanismes de recombinaisons

Dans une cellule solaire, la recombinaison des porteurs constitue une source de pertes qui affectent le courant de court-circuit I_{cc} et la tension de circuit ouvert V_{co} .

Différents mécanismes de recombinaisons peuvent se produire au sein d'un semiconducteur aussi bien en volume qu'en surface. Les principaux mécanismes de recombinaison en volume sont la recombinaison radiative, la recombinaison Auger et la recombinaison SRH (Schokley-Read-Hall), illustrés à la Figure 1.8. Les recombinaisons radiatives et Auger sont des mécanismes de recombinaisons de type intrinsèque qui limitent le rendement de conversion photovoltaïque. Quant à la recombinaison SRH, elle est due à la présence de défauts ou d'impuretés dans la bande interdite du matériau. La recombinaison en surface, illustrée à la Figure 1.9, est un cas particulier de la recombinaison SRH.

On utilise la durée de vie des porteurs, notée τ , pour quantifier les recombinaisons. Elle est définie comme étant le temps qui sépare la recombinaison d'une paire électron-trou de sa génération. D'une manière générale, elle peut être déterminée à partir du taux de recombinaison U comme suit :

$$\tau = \Delta n / U \quad (1.22)$$

où Δn est la densité des porteurs minoritaires en excès. On parle aussi de porteurs injectés.

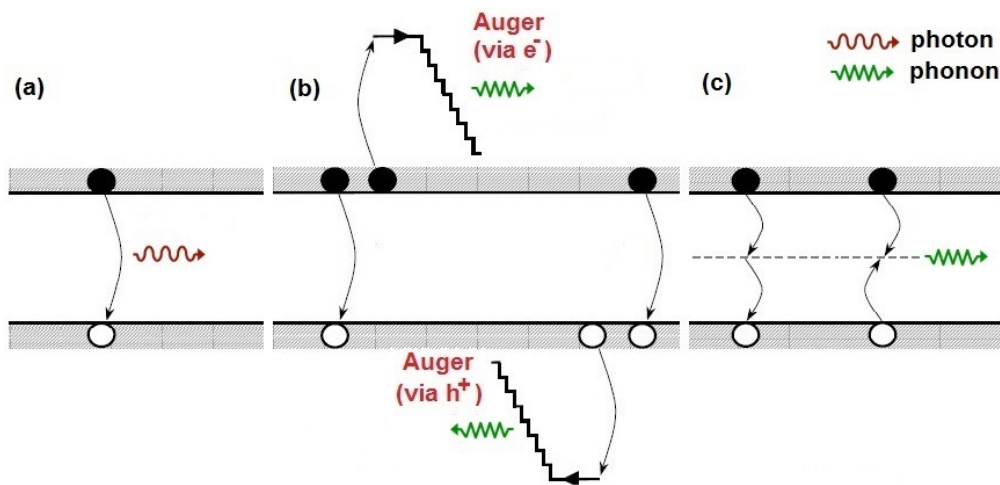


Figure 1.8 – Schéma illustrant les mécanismes de recombinaisons (a) Radiatif (b) Auger (c) Shockley-Read-Hall (SRH) [30].

1.7.1 Recombinaison radiative

Le processus de recombinaison radiative est illustré à la Figure 1.8a. Il correspond à l'annihilation d'une paire électron-trou qui s'accompagne de l'émission d'un photon dont l'énergie est proche de celle du gap [30]. Les recombinaisons radiatives sont des transitions interbandes directes de porteurs ayant lieu principalement dans les

semiconducteurs à gap direct. Dans les semiconducteurs à gap indirect, ce processus de recombinaison est moins probable étant donné que la recombinaison d'une paire électron-trou doit faire intervenir un photon et un phonon.

Le taux de recombinaison radiatif noté U_{rad} est proportionnel à la densité des électrons et des trous libres dans le semiconducteur et s'exprime de manière suivante :

$$U_{rad} = B n p \quad (1.23)$$

où B est le coefficient de recombinaison radiative.

D'après l'équation (1.22), les durées de vie radiatives dans les semiconducteurs de type n et de type p en régime de faibles niveaux d'injection ($\tau_{rad,li}$) et de forts niveaux d'injection ($\tau_{rad,hi}$) peuvent s'écrire :

$$\tau_{rad,li} = \frac{1}{B N_{dop}} \quad \text{et} \quad \tau_{rad,hi} = \frac{1}{B \Delta n} \quad (1.24)$$

où N_{dop} est la concentration des atomes donneurs (N_D) ou accepteurs (N_A).

On peut remarquer que la durée de vie radiative est inversement proportionnelle à la densité des porteurs ($\tau_{rad} \propto 1/n$). Elle est constante pour les faibles niveaux d'injection mais diminue quand le niveau d'injection augmente.

1.7.2 Recombinaisons Auger

Il s'agit d'un mécanisme de recombinaison à transitions directes non radiatives observé dans les semiconducteurs où la densité de porteurs libres est particulièrement élevée. Dans ce processus de recombinaison, l'énergie libérée lors de la recombinaison d'une paire électron-trou est cédée à un troisième porteur libre (électron ou trou). Ce dernier se retrouve dans un état excité puis se thermalise en émettant un phonon comme illustré à la Figure 1.8b [31]. Le taux de recombinaison Auger est donné par :

$$U_{Auger} = C_n n^2 p + C_p n p^2 \quad (1.25)$$

où C_n et C_p sont les coefficients Auger des électrons et des trous respectivement.

Les durées de vie associées aux recombinaisons Auger en régime de faibles niveaux d'injection ($\tau_{Auger,li}$) et de forts niveaux d'injection ($\tau_{Auger,hi}$) sont :

- pour le silicium de type N :

$$\tau_{Auger,li} = \frac{1}{C_n N_D^2} \quad \text{et} \quad \tau_{Auger,hi} = \frac{1}{(C_n + C_p)\Delta p^2} \quad (1.26)$$

- pour le silicium type P :

$$\tau_{Auger,li} = \frac{1}{C_p N_A^2} \quad \text{et} \quad \tau_{Auger,hi} = \frac{1}{(C_n + C_p)\Delta n^2} \quad (1.27)$$

D'après les équations (1.26) et (1.27), la durée de vie Auger est inversement proportionnelle au carré de la densité des porteurs ($\tau_{Auger} \propto 1/n^2$), ce qui montre une forte dépendance avec le niveau d'injection comparé à la durée de vie radiative.

1.7.3 Recombinaisons Shockley-Read-Hall ou SRH

Le mécanisme de recombinaisons SRH, illustré à la Figure 1.8c, appelé également recombinaison assistée par les pièges [32] est un processus de recombinaison via des niveaux d'énergie discrets dans la bande interdite introduits par des impuretés ou des défauts (lacunes, dislocations) dans le matériau. Quand les niveaux sont localisés au voisinage du milieu de la bande interdite, ils sont associés à des défauts profonds qui sont des centres de recombinaison particulièrement efficaces. Quant aux niveaux près des bords de bandes, ils se comportent comme des pièges [33].

Le taux de recombinaison associé à un état de piège discret (Single Level Trap en anglais) situé à un niveau d'énergie E_t s'exprime selon la statistique de Shockley-Read-Hall, sous la forme suivante [32] :

$$U_{SLT} = \frac{pn - n_i^2}{\tau_{n0}(p + n_i e^{(E_i - E_t)/kT}) + \tau_{p0}(n + n_i e^{(E_t - E_i)/kT})} \quad (1.28)$$

où n_i est la concentration intrinsèque, E_i est le niveau d'énergie intrinsèque, τ_{n0} et τ_{p0} sont les durées de vie des électrons et des trous respectivement. Ces dernières sont données par les expressions suivantes :

$$\tau_{n0} = \frac{1}{\sigma_n v_{th} N_t} \quad \text{et} \quad \tau_{p0} = \frac{1}{\sigma_p v_{th} N_t} \quad (1.29)$$

où N_t est la densité d'état de pièges discrets, v_{th} est la vitesse thermique des porteurs de charge, σ_n et σ_p sont les sections efficaces de capture. Ces dernières représentent l'aptitude d'un niveau de piège à capturer un électron et un trou, respectivement.

La durée de vie SRH liée à un piège discret de niveau d'énergie E_t est donnée par l'expression suivante :

$$\tau_{SLT} = \frac{\tau_{n0}(p_0 + p_1 + \Delta n) + \tau_{p0}(n_0 + n_1 + \Delta n)}{n_0 + p_0 + \Delta n} \quad (1.30)$$

où n_0 et p_0 sont respectivement la concentration des électrons et celle des trous à l'équilibre thermodynamique, n_1 (respectivement p_1) est définie comme la densité des électrons (de trous) dans la bande de conduction E_c (dans la bande de valence E_v) lorsque le niveau de Fermi E_F coïncide avec le niveau de piège E_t .

Pour les centres profonds, les durées de vie SRH en régime de faibles niveaux d'injection ($\tau_{SLT,li}$) et de forts niveaux d'injection ($\tau_{SLT,hi}$) peuvent se simplifier et deviennent :

- pour le silicium de type N :

$$\tau_{SLT,li} = \tau_{p0} \quad \text{et} \quad \tau_{SLT,hi} = \tau_{n0} + \tau_{p0} \quad (1.31)$$

- pour le silicium de type P :

$$\tau_{SLT,li} = \tau_{n0} \quad \text{et} \quad \tau_{SLT,hi} = \tau_{n0} + \tau_{p0} \quad (1.32)$$

Le taux net de recombinaison R_{SRH} est la somme des contributions de chaque niveau de piège i situé à un niveau d'énergie $E_{t,i}$ dans la bande interdite, tel que [21] :

$$R_{SRH} = \sum_i R_{SLT,i} \quad (1.33)$$

La durée de vie SRH peut être déterminée à partir de l'expression suivante :

$$\frac{1}{\tau} = \sum_i \frac{1}{\tau_{SLT,i}} \quad (1.34)$$

où $\tau_{SLT,i}$ est la durée de vie associée à un piège i situé à un niveau d'énergie $E_{t,i}$.

1.7.4 Recombinaison en surface

Les surfaces et les interfaces représentent une rupture du réseau cristallin du silicium donnant lieu à un très grand nombre de liaisons pendantes [34]. Il en résulte une forte densité de défauts dans la bande interdite près de la surface du semiconducteur, comme illustré à la Figure 1.9. Ces états de surface sont le siège de phénomènes de recombinaisons dont la cinétique est décrite par le modèle SRH

reformulé en termes de recombinaison par unité de surface plutôt que par unité de volume.

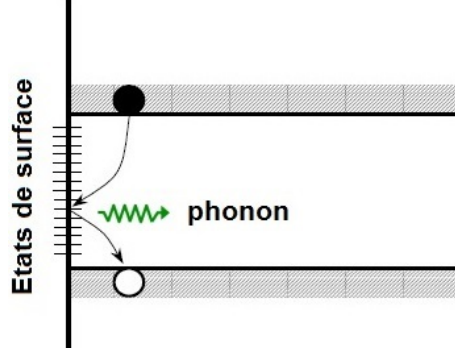


Figure 1.9 – Schéma illustrant le mécanisme de recombinaison en surface [30].

Pour un défaut donné situé à un niveau d'énergie E_{ts} , le taux de recombinaison en surface peut s'écrire :

$$U_{SLT,S} = \frac{n_s p_s - n_i^2}{\frac{n_s + n_i e^{(E_{ts} - E_i)/kT}}{S_{p0}} + \frac{p_s + n_i e^{(E_i - E_{ts})/kT}}{S_{n0}}} \quad (1.35)$$

où : n_s et p_s sont les densités des électrons et des trous en surface, S_{n0} et S_{p0} sont les vitesses de recombinaisons des électrons et des trous respectivement. Pour les recombinaisons en surface, on parle de vitesse de recombinaison plutôt que de durée de vie laquelle est associée aux recombinaisons en volume.

on a :

$$S_{n0} = \sigma_n v_{th} N_{ts} \quad \text{et} \quad S_{p0} = \sigma_p v_{th} N_{ts} \quad (1.36)$$

où N_{ts} est la densité d'états de surface par unité de surface, v_{th} est la vitesse thermique des porteurs de charge, σ_n et σ_p sont les sections de capture efficaces du défaut.

Étant donné le nombre élevé des états de surface, leur répartition peut être considérée comme quasi-continue dans la bande interdite. Dans ce cas, leur densité et leur section de capture efficace seront fonctions de l'énergie. En utilisant la densité d'états d'interface notée $D_{it}(E)$ (au lieu de N_{ts} définie pour une niveau d'énergie spécifique), le taux de recombinaison en surface U_s s'obtient en intégrant l'équation (1.35) sur toute la bande interdite, on a [30] :

$$U_s = \int_{E_V}^{E_C} \frac{v_{th}(n_s p_s - n_i^2)}{\frac{n_s + n_i e^{(E_{ts} - E_i)/kT}}{\sigma_p(E)} + \frac{p_s + n_i e^{(E_i - E_{ts})/kT}}{\sigma_n(E)}} D_{it}(E) dE \quad (1.37)$$

De manière similaire à la définition de la durée de vie (Equation (1.22)), la vitesse de recombinaison en surface, notée S , peut être définie comme :

$$S = \frac{U_s}{\Delta n_s} \quad (1.38)$$

où Δn_s est la concentration des porteurs injectés à la surface.

1.7.5 Durée de vie effective

La durée de vie effective est la grandeur mesurée qui englobe l'ensemble des mécanismes de recombinaison en volume et en surface [34].

$$\frac{1}{\tau_{\text{eff}}} = \frac{1}{\tau_{\text{rad}}} + \frac{1}{\tau_{\text{Auger}}} + \frac{1}{\tau_{\text{SRH}}} + \frac{1}{\tau_s} \quad (1.39)$$

où les trois premiers termes de l'équation (1.39) peuvent être regroupés en un seul terme qui traduit la durée de vie en volume, tel que :

$$\frac{1}{\tau_{\text{vol}}} = \frac{1}{\tau_{\text{rad}}} + \frac{1}{\tau_{\text{Auger}}} + \frac{1}{\tau_{\text{SRH}}} \quad (1.40)$$

Le taux de recombinaison effectif d'un matériau semiconducteur peut être exprimé par :

$$\begin{aligned} U_{\text{eff}} &= U_{\text{vol}} + 2U_s \\ \implies \frac{\Delta n}{\tau_{\text{eff}}} &= \frac{\Delta n}{\tau_{\text{vol}}} + 2S \frac{\Delta n_s}{W} \end{aligned} \quad (1.41)$$

En faisant l'hypothèse que la génération des porteurs est uniforme sur toute l'épaisseur de l'échantillon W ($\Delta n = \Delta n_s$), ce qui suppose de faibles valeurs de S , l'équation (1.41) se simplifie et devient :

$$\frac{1}{\tau_{\text{eff}}} = \frac{1}{\tau_b} + \frac{2S}{W} \quad (1.42)$$

Les phénomènes de recombinaisons sont à l'origine des pertes électriques dans les cellules solaires qui affectent leur rendement. Il est donc nécessaire d'optimiser les matériaux et les interfaces afin de maximiser les durées de vie des porteurs et donc leur collecte.

1.8 Réponse spectrale et rendement quantique

Les paramètres électriques rendent compte des performances globales d'une cellule solaire. Néanmoins, une analyse plus précise de ses performances peut s'effectuer en ayant recours à la notion de rendement quantique. Ce dernier est évalué à partir de la mesure de la réponse spectrale d'une cellule solaire qui consiste à illuminer la surface de celle-ci à l'aide d'un spot monochromatique et à mesurer la densité de courant de court-circuit J_{cc} générée à différentes longueurs d'ondes λ du spot [29].

La réponse spectrale notée RS , est définie comme le rapport entre la densité de courant J_{cc} et la densité de puissance P_i , pour chaque longueur d'onde :

$$RS(\lambda) = \frac{J_{cc}(\lambda)}{P_i(\lambda)} \quad (1.43)$$

La densité de puissance P_i est liée au flux de photons incidents $\phi(\lambda)$ par la relation :

$$P_i(\lambda) = E_{photon} \times \phi(\lambda) \quad (1.44)$$

La capacité d'une cellule solaire sous illumination à générer et à collecter les porteurs est exprimée par le rendement quantique externe, noté $EQE(\lambda)$ (External Quantum Efficiency) définie comme le rapport entre le nombre de paires électron-trou collectées et le nombre de photons incidents pour une longueur d'onde λ :

$$EQE(\lambda) = \frac{J_{cc}/q}{P_i(\lambda)/E_{photon}} \quad (1.45)$$

Ce qui conduit à la relation :

$$EQE(\lambda) = \frac{hc}{q\lambda} \times RS(\lambda) \quad (1.46)$$

où : q est la charge de l'électron.

En mesurant la réflectivité $R(\lambda)$, on peut déduire le rendement quantique interne, noté $IQE(\lambda)$ (Internal Quantum Efficiency). Celui-ci ne tient compte que des photons ayant pénétré la cellule solaire. Il est lié au rendement quantique externe $EQE(\lambda)$ par l'équation suivante :

$$EQI(\lambda) = \frac{EQE(\lambda)}{1 - R(\lambda)} \quad (1.47)$$

Le rendement quantique interne tient compte des caractéristiques propres de la cellule solaire telles que la longueur de diffusion, les recombinaisons en surface et en volume.

La densité de courant de court-circuit totale produite par la cellule solaire s'obtient par une intégration du rendement quantique externe sur l'ensemble du spectre :

$$J_{cc} = \int_{\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} EQE(\lambda) \phi_{AM1.5}(\lambda) d\lambda \quad (1.48)$$

1.9 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre une vue d'ensemble d'aspects théoriques concernant la conversion photovoltaïque. Nous avons parlé du rayonnement solaire et de son interaction avec la matière. Puis, nous avons décrit le principe de fonctionnement d'une cellule solaire classique PN sous éclairage. Nous avons vu le processus d'absorption ainsi que les mécanismes de recombinaisons dans un matériau semi-conducteur. Enfin, les notions de réponse spectrale et de rendement quantique ont été abordées.

Les points essentiels que nous pouvons retenir sont :

- les cellules solaires sont caractérisées à une température de 25 °C sous un spectre de référence AM1.5G pour une irradiance 1000 W · m⁻². Il s'agit de conditions de tests standards (STC).
- pour être absorbés, les photons doivent posséder une énergie supérieure au gap du semiconducteur. La thermalisation issue des photons plus énergétiques et les photons non absorbés par le matériau en raison de leur énergie inférieure au gap du matériau constituent des pertes optiques ou physiques pour une cellule solaire.
- la conversion photovoltaïque consiste essentiellement en l'absorption de photons par le matériau et la création de paires électron-trou, la dissociation des porteurs et leur collecte jusqu'aux électrodes. Le dispositif de base à la conversion photovoltaïque est la jonction PN qui constitue un dispositif à diffusion.
- les paramètres électriques obtenus à partir de la caractéristique I(V) de la jonction PN sous illumination sont la tension de circuit ouvert V_{co}, la densité de courant de court-circuit J_{cc} et le facteur de forme FF. Le rendement de conversion E_{ff} est le rapport entre la puissance maximale délivrée par la cellule solaire et la puissance incidente. Il peut être également exprimé en fonction des paramètres V_{co}, J_{cc} et le facteur de forme FF. Pour obtenir de bons rendements de conversion, il y a lieu d'améliorer la tension V_{co} ou la densité J_{cc} et cela revient à optimiser les cellules solaires.

- Les paramètres électriques renseignent sur les performances globales de la cellule solaire. Quant au rendement quantique, il permet d'évaluer ces performances en fonction de la longueur d'onde λ du spectre solaire. Le rendement quantique est obtenu à partir de la réponse spectrale de la cellule solaire. Il exprime la capacité de celle-ci à générer et à collecter les porteurs. Il y a une distinction à faire entre le rendement quantique externe (EQE) et le rendement quantique interne (IQE). Le premier se définit comme le rapport entre le nombre de paires électron-trou collectées et le nombre de photons incidents pour une longueur d'onde λ tandis que le second ne prend en compte que les photons absorbés par la cellule solaire, c'est la raison pour laquelle on retrouve un terme de réflexion dans son expression.
- les résistances série et parallèle représentent des pertes ohmiques dans la cellule solaire qui affectent principalement le facteur de forme FF.
- l'absorption du rayonnement solaire dans un matériau se fait selon une loi exponentielle décroissante en fonction de la distance de pénétration et du coefficient d'absorption α , appelée loi de Beer-Lambert-Bouguer. Le coefficient d'absorption α est fonction de la longueur d'onde λ et du coefficient d'extinction k , il traduit la probabilité d'absorption d'un photon par le matériau. Il en ressort de la loi Beer-Lambert-Bouguer que les photons les plus énergétiques sont absorbés en quasi-totalité près de la surface illuminée, les photons les moins énergétiques sont absorbés plus en profondeur dans le matériau ou sont transmis vers l'extérieur.
- les différents mécanismes de recombinaisons peuvent avoir lieu en volume et en surface et sont à l'origine de pertes électriques dans la cellule solaire qui affectent son rendement. Il est donc nécessaire d'optimiser les matériaux et les interfaces afin de maximiser les durées de vie des porteurs et donc leur collecte.

Dans le chapitre suivant, nous allons nous intéresser au silicium amorphe hydrogéné qui constitue le matériau de base des cellules solaires en couches minces de silicium.

Etude des propriétés du silicium amorphe hydrogéné

Le silicium amorphe hydrogéné constitue le matériau de base des cellules solaires en couches minces de silicium. Ces dernières, comme il a été mentionné au chapitre 1, font partie de la seconde génération de cellules solaires pour les applications terrestres.

Dans ce chapitre, nous allons particulièrement nous intéresser au a-Si:H. Nous commencerons par décrire sa structure atomique et la distribution de la densité d'états dans la bande interdite qui en résulte de cette structure. Puis, nous verrons comment réduire la densité des défauts dans ce matériau et nous parlerons de son caractère métastable. Après, nous aborderons les propriétés optiques puis les mécanismes de dopage du a-Si:H. Une dernière partie de ce chapitre sera consacrée au silicium microcristallin hydrogéné ($\mu\text{c-Si:H}$) qui constitue une forme microcristalline du a-Si:H.

2.1 Structure atomique du silicium amorphe hydrogéné

Le silicium cristallin cristallise dans la structure diamant où chaque atome de silicium établit des liaisons covalentes avec ses quatre proches voisins formant ainsi un tétraèdre illustré à la Figure 2.1. A température ambiante, la longueur moyenne d'une liaison est de 2,35 Å et l'angle moyen qui sous-tend deux liaisons voisines ou l'angle tétraédrique, est de 109,47°. La Figure 2.2a illustre l'ordre parfait dans un réseau de silicium cristallin.

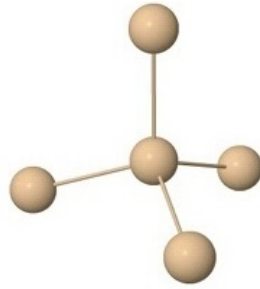


Figure 2.1 – Tétraèdre de base dans le réseau du silicium cristallin.

Le silicium peut également se présenter sous la forme d'un matériau désordonné appelé silicium amorphe (a-Si) [35]. Lors de sa première introduction au début des années soixante, il présentait peu d'intérêt pour l'industrie des semi-conducteurs. En effet, les premières couches de a-Si déposées par pulvérisation ou évaporation possédaient un grand nombre de défauts électroniques dans la bande interdite [36]. Après une dizaine d'années, il a été constaté que l'utilisation d'un plasma de silane (SiH_4) pour le dépôt du silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) permettait d'obtenir un matériau où 99,9% des défauts étaient saturés (passivés) par l'hydrogène [37]. Ceci lui donnait de meilleures caractéristiques et le rendait enfin utilisable comme semi-conducteur. Dès lors, la recherche sur le a-Si:H s'est intensifiée, notamment dans le domaine des cellules solaires photovoltaïques en couches minces [38].

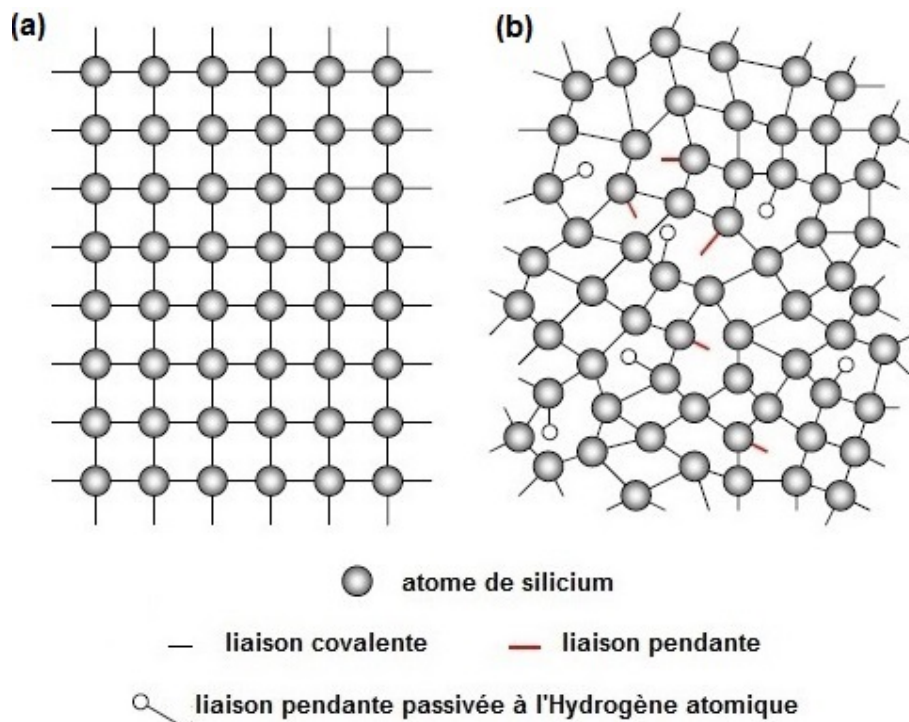


Figure 2.2 – Structure de réseau : (a) Silicium cristallin (c-Si) (b) Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) [39].

Pour décrire une structure désordonnée d'un solide, on se base sur le modèle du réseau aléatoire continu (ou RAC), selon lequel la structure locale ressemble à celle d'un cristal mais les unités de base sont par contre liées les unes aux autres de façon aléatoire [35]. Pour le silicium amorphe, cette notion de réseau aléatoire est illustrée à la Figure 2.2b. Sa structure possède un ordre tétraédrique local mais les angles et les longueurs de liaisons varient légèrement autour de valeurs moyennes du silicium cristallin. Cette dispersion augmente avec la distance de sorte qu'après 4 ou 5 distances interatomiques, les positions sont aléatoirement distribuées et l'ordre à grande distance est ainsi perdu.

2.2 Défauts de coordinations

La notion de défaut dans un matériau amorphe et dans un cristal est différente. Dans un cristal, on entend par défaut toute rupture de la périodicité du réseau. Il peut s'agir par exemple d'une lacune ou d'un atome en position interstitielle. Dans le a-Si:H, on parle plutôt de défauts de coordination qui correspondent à un excès ou un défaut de liaisons covalentes dans un atome de silicium. Ces défauts sont inhérents au caractère désordonné du matériau et ont des signatures particulières dans la bande interdite. Ils sont classés par indice de coordination (i), correspondant à l'écart en nombre de liaisons par rapport à la coordination du silicium tétravalent ($\text{Si}_{(4)}$) [40] :

- $i = -2$ ($\text{Si}_{(2)}$) : Lacune double (Divancy)
- $i = -1$ ($\text{Si}_{(3)}$) : Liaison pendante (Dangling Bond)
- $i = 0$ ($\text{Si}_{(4)}$) : Liaison faible (Weak Bond)
- $i = 1$ ($\text{Si}_{(5)}$) : Liaison flottante (Floating Bond)

Les défauts de coordination prépondérants dans les couches de a-Si:H intrinsèques mesurées par la technique de résonance paramagnétique électronique (RPE) semblent correspondre aux liaisons pendantes [41, 42].

2.3 Densité d'états

Il en résulte de la périodicité du réseau cristallin une structure de bande formée d'une bande de conduction et d'une bande de valence nettement séparées par une bande interdite [43], comme illustrée à la Figure 2.3a. Dans le cas du silicium amorphe hydrogéné, étant donné que sa structure préserve un certain ordre local proche du silicium cristallin, il peut lui être attribué une bande de valence et une bande

de conduction [44]. Cependant, les bandes d'énergie ne peuvent plus être décrites par des relations de dispersion $E(k)$. Le désordre à longue distance qui caractérise sa structure est responsable de la localisation des fonctions d'ondes dans l'espace. D'après la théorie [45] de la localisation, proposée par Anderson en 1958, lorsque le désordre dépasse un certain seuil, les fonctions d'onde des électrons perdent leur cohérence de phase d'un atome à l'autre, si bien que la conduction via ces états est nulle à 0 K. Ces états, répartis dans la bande interdite du matériau, sont dits localisés en opposition aux états étendus des bandes de conduction et de valence [40]. Dès lors, la densité d'état en fonction de l'énergie $N(E)$ étant partout non nulle, il n'y a pas de véritable bande interdite au sens du c-Si. Les limites séparant les états étendus (zones à haute mobilité) des états localisés (zones à faible mobilité) sont appelées bords de mobilité (E_C et E_V), comme proposé par Mott et al. [36], qui définissent ce qu'on appelle le gap de mobilité dont la valeur est de 1,6 à 1,8 eV à une température de 300 K [46]. Il s'agit d'une pseudo-bande où les états sont localisés et la mobilité est nulle [38]. Les états proches des bords de bande de valence et de conduction constituent ce qu'on appelle des queues de bandes (ou band tails en anglais), et ceux localisés au milieu de la pseudo-bande interdite sont appelés liaisons pendantes (ou dangling bonds en anglais) qui correspondent à des défauts profonds. La Figure 2.3b illustre la densité d'états dans le silicium amorphe hydrogéné.

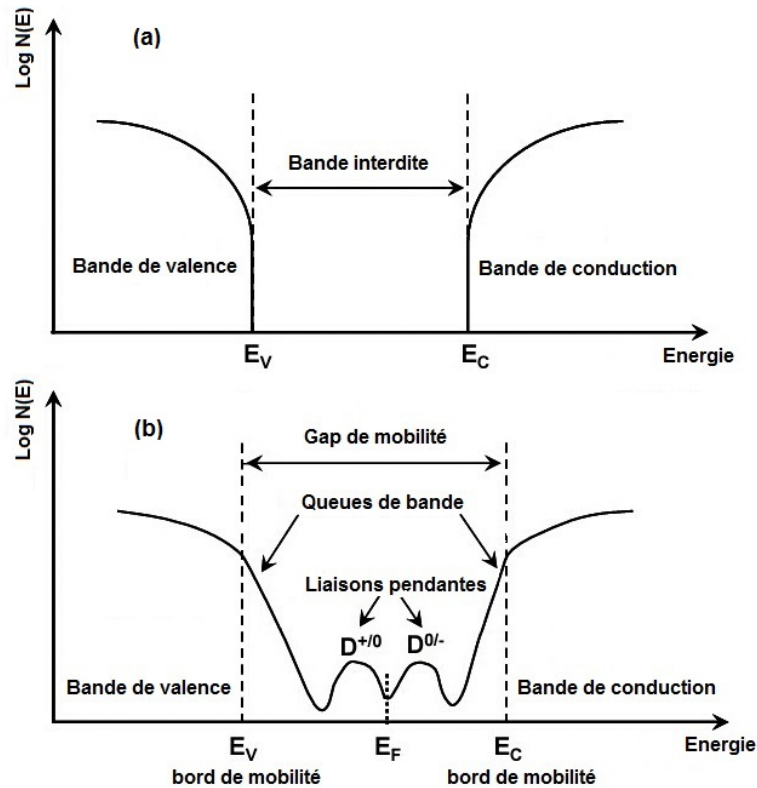


Figure 2.3 – Densité d'état en fonction de l'énergie : (a) Silicium c-Si (b) Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) [38].

2.3.1 Les états de queues de bandes

Les queues de bandes sont les états localisés en bord de bande de valence et de bande de conduction. Elles sont associées aux fluctuations des longueurs et des angles de liaisons covalentes Si-Si par rapport à la configuration cristalline. Ce désordre conduit à des liaisons Si-Si faibles. La densité d'état $N(E)$ des queues de bandes décroît exponentiellement en allant de l'intérieur des bords de bande jusqu'au milieu du gap de mobilité [40] avec un écart énergétique au bord de bande. Les queues de bandes sont caractérisées par une largeur, appelée énergie d'Urbach, qui donne une indication sur le degré du désordre dans le matériau. Quand celui-ci est important, la largeur des queues de bandes est plus large. On observe par ailleurs une asymétrie entre les queues de bandes de valence et de bande de conduction attribuée à la différence des masses effectives des électrons et des trous localisés ainsi qu'aux fluctuations encore plus fortes en bord de bande de valence [47]. La queue de bande de valence est en fait plus large que la queue de bande de conduction, ce qui conduit à une réduction de la mobilité des trous [48].

Les queues de bande de conduction et bande de valence sont de type accepteur et de type donneur respectivement. Elles constituent une zone de piégeage pour les porteurs libres, où ils sont mobilisés ($\mu=0$) puis réémis dans les bandes correspondantes sous l'effet de la température (agitation thermique), de la lumière ou de l'application d'un champ électrique. Il en résulte une réduction de la mobilité des porteurs libres d'un facteur de 10^4 par rapport à celle des porteurs libres dans le c-Si [38]. D'autre part, les queues de bande sont des pièges à prendre en compte dans la description du champ de charge d'espace. Du fait de la largeur de la queue de bande de valence, une quantité importante de charges positives peut être accumulée ayant pour effet de déformer le champ électrique interne de la cellule solaire. Par conséquent, la collection de porteurs photogénérés est rendue moins efficace, ce qui entraîne une réduction des performances de la cellule solaire. Il est donc nécessaire que la largeur de la queue de bande de valence soit la plus faible possible. Quant à la queue de bande de conduction, sa largeur étant moins prononcée, l'effet des électrons piégés sur le champ électrique est considérée comme négligeable. La largeur de la queue de bande de valence doit se situer entre 45 à 50 meV alors que celle de la queue de bande de conduction est approximativement égale à 25 meV [48].

La densité de pièges ionisés N_{TS} dans les queues de bandes peut être calculée à partir de la théorie de Taylor et Simmons [49] pour une distribution arbitraire des niveaux pièges. La densité des pièges due aux queues de bandes est :

- pour la queue de bande de valence :

$$N_{TS_D} = \int_{E_V}^{E_C} f_D(E)g_D(E)dE \quad (2.1)$$

- pour la queue de bande de conduction :

$$N_{TS_A} = \int_{E_V}^{E_C} f_A(E)g_A(E)dE \quad (2.2)$$

où $f_D(E)$ et $f_A(E)$ sont les fonctions d'occupation des pièges donneurs et accepteurs respectivement, $g_D(E)$ et $g_A(E)$ sont les fonctions de distributions des pièges donneurs et accepteurs respectivement.

En supposant que les états localisés dans les queues de bandes sont monovalents et obéissent au modèle de Shockley et Read [32], Taylor et Simmons [49] ont montré que pour une distribution arbitraire $N(E)$, la fonction d'occupation des états pour le centre recombinant localisé à l'énergie E est la même que celle donnée par Shockley et Read pour un niveau piège discret [47]. On a alors :

- fonction d'occupation des pièges donneurs :

$$f_D(E) = \frac{c_p p + c_n n_1(E)}{c_p(p + p_1(E)) + c_n(n + n_1(E))} \quad (2.3)$$

- fonction d'occupation des pièges accepteurs :

$$f_A(E) = \frac{c_n n + c_p p_1(E)}{c_p(p + p_1(E)) + c_n(n + n_1(E))} \quad (2.4)$$

où :

- ◆ c_n et c_p sont les coefficients de capture des électrons et les trous respectivement dans les queues de bandes.
- ◆ n et p sont les densités de porteurs libres des électrons et des trous respectivement, tels que :

$$n = N_C \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_C}{k_B T}\right) \quad (2.5)$$

$$p = N_V \exp\left(\frac{E_V - E_{Fp}}{k_B T}\right) \quad (2.6)$$

où N_C , N_V sont densités effectives d'états dans la bande de conduction et la bande de valence respectivement, E_{Fn} et E_{Fp} sont les niveaux de Fermi des électrons et des trous respectivement, E_C est l'énergie du bas de la bande

de conduction, E_V est l'énergie du haut de la bande de valence et k_B est la constante de Boltzmann.

- ◆ $n_1(E)$ et $p_1(E)$ sont les concentrations équivalentes des électrons et des trous respectivement si le niveau de Fermi se trouve au niveau piège. En statistique de Maxwell-Boltzmann, $n_1(E)$ et $p_1(E)$ s'expriment par :

$$n_1(E) = N_C \exp\left(\frac{E - E_C}{k_B T}\right) \quad (2.7)$$

$$p_1(E) = N_V \exp\left(\frac{E_V - E}{k_B T}\right) \quad (2.8)$$

Si g_D et g_A sont les densités par unité d'énergie en bord de bande de valence E_V et en bord de bande de conduction E_C respectivement, $k_B T_V$ et $k_B T_C$ sont les énergies caractéristiques des queues de bandes de valence et de conduction respectivement, les fonctions de distributions des pièges accepteurs et donneurs sont données par [50] :

- pour la queue de bande de valence :

$$g_D(E) = \begin{cases} g_D & \text{si } E_V \leq E \leq E_V + \delta E_{td} \\ g_D \exp\left(\frac{E_D + \delta E_{td} - E}{k_B T_D}\right) & \text{si } E_V + \delta E_{td} \leq E \leq E_C \end{cases} \quad (2.9)$$

- pour la queue de bande de conduction :

$$g_A(E) = \begin{cases} g_A \exp\left(\frac{E - E_C + \delta E_{ta}}{k_B T_A}\right) & \text{si } E_V \leq E \leq E_C - \delta E_{ta} \\ g_A & \text{si } E_C - \delta E_{ta} \leq E \leq E_C \end{cases} \quad (2.10)$$

où T_D et T_A sont les températures caractéristiques des queues de bandes de valence et de conduction, respectivement.

Le taux de recombinaison à travers les états de queues de bandes de valence et de conduction est exprimé par [50] :

$$R_{TS} = (np - N_C N_V \exp\left(-\frac{E_G}{k_B T}\right) \int_{E_V}^{E_C} (\alpha_d g_D(E) + \alpha_a g_A(E)) dE \quad (2.11)$$

où $\alpha_d(E)$ et $\alpha_a(E)$ sont donnés par :

$$\alpha_d(E) = \frac{C_n^d C_p^d v_{th}}{C_n^d (n + n_1(E)) + C_p^d (p + p_1(E))} \quad (2.12)$$

$$\alpha_a(E) = \frac{C_n^a C_p^a v_{th}}{C_n^a (n + n_1(E)) + C_p^a (p + p_1(E))} \quad (2.13)$$

où v_{th} est la vitesse thermique des porteurs libres.

2.3.2 Les liaisons pendantes

Les liaisons pendantes sont des états fortement localisés situés au milieu du gap. Il s'agit de défauts profonds liés à la rupture des liaisons faibles Si-Si donnant lieu à des électrons non appariés et sont pour la plupart saturés par un atome d'hydrogène. Les liaisons pendantes sont les principaux centres de recombinaison pour les porteurs libres. Elles sont de type amphotère, ce qui signifie qu'elles peuvent être à la fois de type donneur ou accepteur. Dès lors, une liaison pendante peut avoir trois types de charges :

- une charge positive D^+ si elle cède son électron ;
- une charge neutre D^0 quand elle a un seul électron ;
- une charge négative D^- si elle capture un second électron.

Les défauts profonds sont généralement modélisés par deux gaussiennes : l'une pour les défauts de type accepteurs $D^{0/-}$ et l'autre pour les défauts de type donneurs $D^{+/0}$ [50], comme illustré à la Figure 2.3b.

Dans la couche intrinsèque d'une cellule solaire à base de silicium amorphe hydrogéné, les processus de capture sont beaucoup plus probables que les processus d'émissions thermiques [48]. Le processus de recombinaison via les liaisons pendantes est illustré schématiquement à la Figure 2.4.

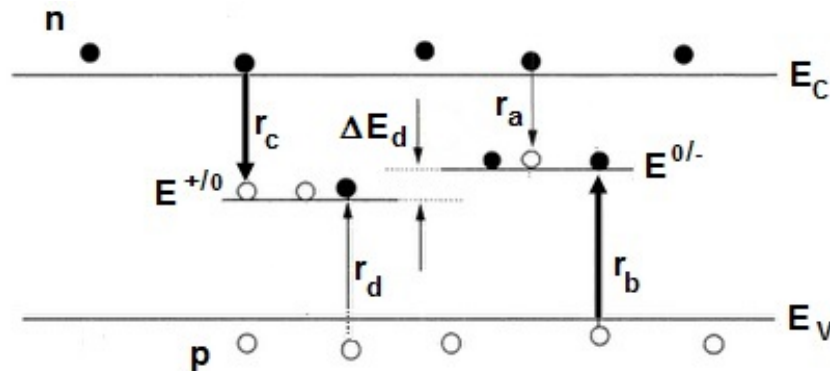


Figure 2.4 – Processus de recombinaison via les liaisons pendantes [48].

Soient :

- r_a : le taux de capture d'un électron libre via une liaison pendante neutre D^0 ;
- r_b : le taux de capture d'un trou libre via une liaison pendante négative D^- ;
- r_c : le taux de capture d'un électron libre via une liaison pendante de charge positive D^+ ;
- r_d : le taux de capture d'un trou libre via une liaison pendante neutre D^0 .

Les processus de capture r_b et r_c (en flèches épaisses) impliquant les charges de signes opposés sont plus rapides comparés aux processus de capture r_a et r_d (en flèches fines) assistés par les liaisons pendantes neutres. Les transitions de D^0 à D^+ et inversement de D^+ à D^0 ont lieu à un niveau d'énergie $E^{+/0}$. Les transitions de D^0 à D^- et inversement de D^- à D^0 ont lieu à un niveau d'énergie $E^{0/-}$. Le niveau d'énergie $E^{0/-}$ est légèrement supérieur au niveau d'énergie $E^{+/0}$ et cela d'une valeur $\Delta E_d = E^{0/-} - E^{+/0}$, appelée énergie de corrélation ou énergie de Hubbard. Celle-ci correspond à l'énergie requise pour ajouter un second électron à une liaison pendante. Dans le silicium amorphe hydrogéné, l'énergie de corrélation est supposée être positive. Expérimentalement, on montre que ΔE_d est égale environ à 0,3 eV [48].

Les statistiques d'occupation des centres pièges associés aux liaisons pendantes sont différentes de celles d'un centre piège discret et cela à cause de l'énergie de corrélation entre les niveaux. Pour les statistiques de piégeage et de recombinaison via les centres pièges à plusieurs niveaux, elles ont été traitées par Sah et Shockley [51, 52]. Celles-ci sont appliquées aux distributions gaussiennes relatives à chaque état [50].

Les densités d'états des liaisons pendantes sont exprimées de la manière suivante :

- pour les états pièges donneurs :

$$N_{GD}^+ = \int_{E_V}^{E_C} n_{db}(E) f^+(E) dE \quad (2.14)$$

- pour les états pièges accepteurs :

$$N_{GA}^- = \int_{E_V}^{E_C} n_{db}(E) f^-(E) dE \quad (2.15)$$

- pour les états pièges neutres :

$$N_{GN}^0 = \int_{E_V}^{E_C} n_{db}(E) f^0(E) dE \quad (2.16)$$

où $f^+(E)$, $f^0(E)$ et $f^-(E)$ sont les fonctions d'occupations ou les probabilités pour qu'une liaison pendante possède zéro, un et deux électrons, $n_{db}(E)$ représente la fonction de distribution des états pièges.

on a :

$$f^+(E) + f^0(E) + f^-(E) = 1 \quad (2.17)$$

Les fonctions d'occupation s'expriment comme suit :

$$f^+(E) = \frac{T^+(E)}{1 + T^+(E) + T^-(E)} \quad (2.18)$$

$$f^-(E) = \frac{T^-(E)}{1 + T^+(E) + T^-(E)} \quad (2.19)$$

$$f^0(E) = \frac{1}{1 + T^+(E) + T^-(E)} \quad (2.20)$$

avec :

$$T^+(E) = \frac{c_p^0 p + c_n^+ n_1(E - \Delta E_d)}{c_n^+ n + c_p^0 p_1(E - \Delta E_d)} \quad (2.21)$$

$$T^-(E) = \frac{c_n^0 n + c_p^- p_1(E + \Delta E_d)}{c_p^- p + c_n^0 n_1(E + \Delta E_d)} \quad (2.22)$$

La fonction de distribution des états pièges $n_{db}(E)$ est de forme gaussienne et centrée sur E_d , elle s'exprime par l'équation suivante :

$$n_{db}(E) = \frac{N_{db}}{\sigma_{db}\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(E - E_d)^2}{2\sigma_{db}^2}\right) \quad (2.23)$$

où N_{db} est la densité totale des liaisons pendantes, σ_{db} la déviation standard de la distribution gaussienne, E_d le niveau d'énergie moyen entre $E^{0/-}$ et $E^{+/0}$ donné par :

$$E_d = \frac{E^{0/-} + E^{+/0}}{2} \quad (2.24)$$

La densité totale des liaisons pendantes N_{db} peut varier entre 10^{15} cm^{-3} et 10^{18} cm^{-3} selon les conditions de dépôt de la couche amorphe.

Le taux de recombinaison à travers les états des liaisons pendantes est donné par l'expression suivante [50] :

$$R_{db} = (np - N_C N_V \exp\left(-\frac{E_G}{kT}\right)) \int_{E_V}^{E_C} \frac{(f^+(E) + f^0(E)) n_{db}(E) v_{th} c_n^+ c_p^0}{c_n^+(n + n_1(E - \Delta E_d)) + c_p^0(p + p_1(E - \Delta E_d))} + \frac{(f^0(E) + f^-(E)) n_{db}(E) v_{th} c_n^0 c_p^-}{c_n^0(n + n_1(E + \Delta E_d)) + c_p^-(p + p_1(E + \Delta E_d))} dE \quad (2.25)$$

2.3.3 États pièges discrets

Les états pièges discrets proviennent de l'introduction intentionnelle ou non d'impuretés lors de l'élaboration des films de a-Si:H. Ils apparaissent dans le gap de

mobilité à un niveau E_{SLT_A} pour les pièges de type accepteur, ou à un niveau E_{SLT_D} pour les pièges de type donneur.

Les taux d'ionisation des états accepteurs et donneurs sont donnés par le formalisme de Shockley, Read et Hall [32] et s'expriment comme suit :

— **la densité des états accepteurs ionisés :**

$$N_{SLT_A}^- = N_{SLT_A} \frac{c_n n + c_p p_1(E_{SLT_A})}{c_n(n + n_1(E_{SLT_A})) + c_p(p + p_1(E_{SLT_A}))} \quad (2.26)$$

— **la densité des états donneurs ionisés :**

$$N_{SLT_D}^+ = N_{SLT_D} \frac{c_p p + c_n n_1(E_{SLT_D})}{c_n(n + n_1(E_{SLT_D})) + c_p(p + p_1(E_{SLT_D}))} \quad (2.27)$$

où N_{SLT_A} et N_{SLT_D} représentent les densités totales des états pièges discrets accepteurs et donneurs localisés aux niveaux E_{SLT_A} et E_{SLT_D} respectivement.

Le taux de recombinaison à travers les états de pièges discrets est donné selon la statistique de Shockley, Read et Hall, par :

$$R_{SLT} = \frac{np - n_1(E_{SLT})p_1(E_{SLT})}{\tau_p(n + n_1(E_{SLT})) + \tau_n(p + p_1(E_{SLT}))} \quad (2.28)$$

où E_{SLT} est le niveau d'énergie des états donneurs ou accepteurs, τ_n et τ_p sont les durées de vie des électrons et des trous respectivement. Elles sont reliées aux densités d'états par les relations suivantes :

$$\tau_n = 1/c_n N_{SLT} v_{th} \quad \text{et} \quad \tau_p = 1/c_p N_{SLT} v_{th} \quad (2.29)$$

2.4 Passivation du silicium amorphe à l'hydrogène

Le silicium amorphe a-Si pur élaboré par les techniques de dépôts sous vide comme la pulvérisation ou l'évaporation, comporte une densité de défauts profonds très élevée de l'ordre de 10^{19} cm^{-3} . Dans cette situation, le niveau de Fermi reste bloqué et le dopage du semiconducteur est rendu impossible [36].

C'est en 1969 que Chittick et al. ont découvert que l'adjonction d'hydrogène atomique au silicium amorphe permettait d'en améliorer considérablement les propriétés de transport électronique [37]. Ceci peut être expliqué par le fait que l'hy-

drogénation du silicium amorphe peut réduire significativement la densité d'états de défauts profonds dans le gap grâce à la saturation des liaisons Si-Si insatisfaites par l'hydrogène atomique. C'est ce qu'on appelle la passivation des liaisons pendantes. Pour du silicium amorphe hydrogéné de qualité solaire, la densité d'états des défauts profonds se situe aux alentours de 10^{15} cm^{-3} , ce qui équivaut à une passivation de 99,9% de liaisons pendantes [53, 54]. Il en résulte au niveau de la structure du matériau moins de distorsions et une diminution du nombre de liaisons faibles. A cet effet, la largeur des queues de bandes est réduite, le gap du a-Si:H apparaît plus large [55] et sa photoconductivité est beaucoup plus meilleure [56].

Aujourd'hui, le a-Si:H est principalement déposé en utilisant les techniques basées sur la dissociation du silane SiH_4 . On peut citer notamment le dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma (PECVD pour Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition) et le dépôt chimique en phase vapeur assisté par fil chaud (HWCVD pour Hot Wire Chemical Vapor Deposition). Ces techniques de dépôt permettent de contrôler la micro-structure, le contenu en hydrogène ainsi que le dopage des couches [57, 58]. Les procédés de dépôt du a-Si:H seront exposés dans le chapitre 3.

2.5 Effet Staëbler-Wronski

Le silicium amorphe hydrogéné est caractérisé par une métastabilité dont l'effet le plus connu est la création de défauts supplémentaires dans le matériau de a-Si:H suite à l'illumination. Il s'agit de l'effet de dégradation induit par la lumière dans le matériau de a-Si:H ou encore appelé effet Staëbler-Wronski ou SWE (Staëbler-Wronski Effect). Ce phénomène a été mis en évidence pour la première fois par D.L Staëbler and C.R. Wronski en 1977 qui est à l'origine de la diminution du rendement initial des cellules solaires à base de a-Si:H quand celles-ci sont soumises à illumination. Les liaisons Si-Si faibles du a-Si:H se brisent sous l'effet de la lumière donnant lieu à une augmentation de la densité des liaisons pendantes dans le gap du matériau. Il en résulte une baisse significative de la photoconductivité qui se traduit par une dégradation des performances photovoltaïques de la cellule solaire à base de a-Si:H . L'effet atteint un état stable au bout de 1000 heures environ d'exposition à la lumière. On parlera ainsi de rendement initial ou stabilisé selon que l'on considère la cellule avant ou après l'illumination. Toutefois, cet effet peut être réversible grâce à un recuit des couches de a-Si:H à une température de 150°C durant quelques heures. Cela permet de passiver à nouveau les nouvelles liaisons pendantes créées pour revenir à l'état initial du matériau [59].

Il faut savoir aussi que si la quantité d'hydrogène incorporée dans le plasma lors des dépôts du silicium amorphe hydrogéné n'est pas suffisamment contrôlée, cela

pourrait favoriser l'effet Staëbler-Wronski. D'autre part, les atomes de silicium liés à deux atomes d'hydrogène notée Si-H₂ constituent une configuration des moins stables que lorsque le silicium est lié à un seul atome d'hydrogène et peut par conséquent contribuer de manière prononcée à l'effet Staëbler-Wronski.

2.6 Propriétés optiques du a-Si:H

Le coefficient d'absorption et le gap représentent les principales propriétés optiques du a-Si:H.

2.6.1 Coefficient d'absorption

Contrairement au silicium cristallin, le a-Si:H possède un gap direct. Cela est dû à l'absence de périodicité dans ce matériau qui fait que le vecteur d'onde n'est plus un paramètre caractéristique des fonctions d'ondes. Par conséquent, la règle de sélection liée au vecteur d'onde est levée, et l'échange simultané d'un phonon pour absorber un photon et exciter un électron n'est plus nécessaire, ce qui rend l'absorption plus facile. Le coefficient d'absorption du silicium amorphe dans la région du visible du spectre solaire est alors bien plus élevé par rapport au c-Si [60].

La Figure 2.5 représente le coefficient d'absorption et la profondeur de pénétration $d_\lambda = 1/\alpha$ du silicium cristallin, du silicium amorphe hydrogéné et du silicium microcristallin hydrogéné en fonction de la longueur d'onde λ et de l'énergie E .

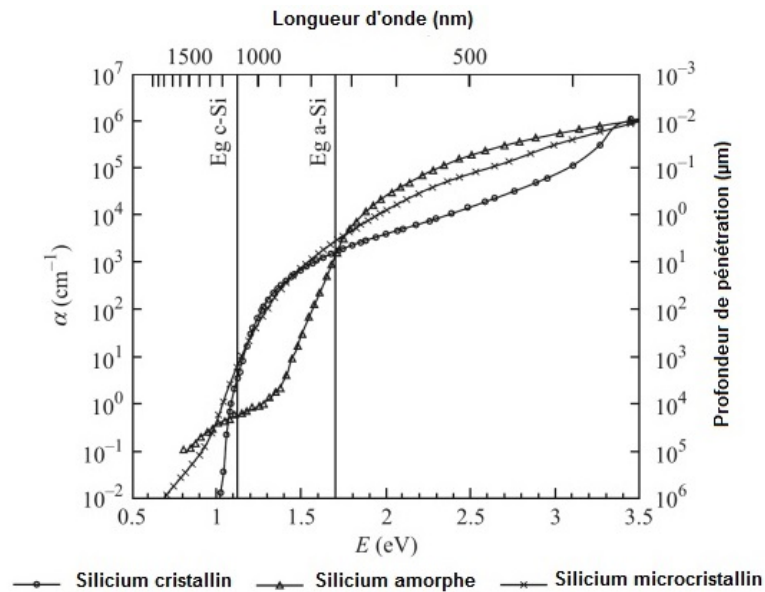


Figure 2.5 – Coefficient d'absorption et profondeur de pénétration du a-Si:H, du c-Si et du silicium microcristallin hydrogéné (μ c-Si:H) [39].

Le coefficient d'absorption du a-Si:H est très élevé aux longueurs d'ondes inférieures environ à 750 nm (domaine du visible) et une épaisseur de couche de matériau inférieure à 1 μm suffit pour absorber la majeure partie de cette région du spectre [39]. Au-delà des 750 nm, l'absorption décroît rapidement et seule une augmentation de l'épaisseur de couche de a-Si:H pourrait permettre d'absorber plus de photons. Cependant, cette épaisseur doit se limiter à une valeur inférieure à 0,5 μm afin de réduire l'effet Staëbler-Wronski. Le fort coefficient d'absorption du a-Si:H rend celui-ci potentiellement intéressant dans le domaine du photovoltaïque en technologie couches minces où les rendements stabilisés obtenus atteignent aujourd'hui les 10 % [9].

2.6.2 Notions de gap de mobilité et de gap optique dans le a-Si:H

Contrairement au silicium cristallin, il a lieu de distinguer entre le gap de mobilité et le gap optique dans le a-Si:H. En effet, comme les états localisés des queues de bande participent à l'absorption, il en résulte un gap optique légèrement plus faible que le gap de mobilité $E_{\mu} = E_C - E_V$ [61]. L'évaluation du gap optique se fait le plus fréquemment à l'aide d'une convention qui consiste à mesurer l'énergie correspondante à une absorption alpha ($E_{0\alpha}$ pour $\alpha = 10^4 \text{ cm}^{-1}$ par exemple). D'autres méthodes (E_{Tauc} , E_{Cody}) se basent sur des extrapolations de la courbe d'absorption en fonction de l'énergie. Toutefois, la détermination du gap optique reste arbitraire et on ne peut établir une comparaison entre différents matériaux que si les gaps optiques correspondants ont été déterminés à partir d'une même méthode [62]. Quant au gap de mobilité, il est difficilement mesurable de façon directe. Selon les modèles et les cas, on a $E_{\mu} \approx E_g + 150 \text{ meV}$ [61], où E_g est le gap optique.

D'autre part, le gap optique du a-Si:H peut être modulable. En effet, il augmente avec la concentration de l'hydrogène et peut être compris entre 1,7 eV et 1,8 eV. Il peut également varier dans les alliages de a-Si:H tels que germaniure de silicium amorphe hydrogéné (a-SiGe:H) et le carbure de silicium amorphe hydrogéné (a-SiC:H). Le a-SiGe:H s'obtient en incorporant un gaz contenant du germanium comme le germane (GeH_4) au mélange de silane. Quant au a-SiC:H, il résulte de l'incorporation d'un gaz contenant du carbone comme le méthane (CH_4). En variant la concentration des gaz, il est possible de jouer sur la valeur du gap optique de ces alliages. En effet, l'augmentation de la concentration de germane se traduit par une diminution du gap optique dans le a-SiGe:H [63] et l'augmentation de la concentration du méthane se traduit par une augmentation du gap optique dans le a-SiC:H [64]. Le Tableau 2.1 indique la plage de valeurs des gaps optiques pour les alliages amorphes.

Alliages amorphes	E_g (eV)
a-SiGe:H	1,2 - 1,7
a-SiC:H	1,1 - 2,2

Tableau 2.1 – Gap optique des alliages amorphes a-SiGe:H et a-SiC:H [21].

2.7 Mécanismes de dopage dans le silicium amorphe hydrogéné

En 1975, les chercheurs Walter Spear et Peter LeComber de l'Université de Dundee en Ecosse sont parvenus à doper le a-Si:H en introduisant des gaz, comme la phosphine PH_3 (pour le dopage de type n) ou le diborane B_2H_6 (pour le dopage de type p), au silane SiH_4 du plasma [39]. Par conséquent, le silicium amorphe hydrogéné pouvait très bien remplir la fonction de semiconducteur. Depuis, les études sur ce matériau se sont multipliées et les premiers dispositifs fonctionnels à base de a-Si:H ont été mis au point. Parmi les nombreuses applications aujourd'hui du a-Si:H, nous citons les cellules photovoltaïques (diodes p-i-n ou cellules à hétérojonctions), les matrices d'adressages pour écrans plats (TFT : Thin Film Transistors), les détecteurs optoélectroniques à bas coût (diodes p-i-n) et les détecteurs de rayonnement (diodes p-i-n) [61].

2.7.1 Effet du dopage sur la conductivité électrique du a-Si:H

La Figure 2.6 montre l'effet du dopage sur la conductivité électrique à température ambiante σ_{RT} du a-Si:H. La quantité de dopant est donnée par les rapports $N_{\text{PH}_3}/N_{\text{SiH}_4}$ et $N_{\text{B}_2\text{H}_6}/N_{\text{SiH}_4}$ pour les dopages de type n et de type p respectivement, où N exprime le nombre de molécules par unité de volume du mélange gazeux.

La conductivité σ_{RT} augmente lorsque le rapport $N_{\text{PH}_3}/N_{\text{SiH}_4}$ (dopage de type n) ou $N_{\text{B}_2\text{H}_6}/N_{\text{SiH}_4}$ (dopage de type p) augmente. L'énergie d'activation du a-Si:H intrinsèque dont la valeur est de 0,7 à 0,8 eV diminue à environ 0,15 eV quand le matériau est dopé au phosphore et à 0,3 eV quand le matériau est dopé au bore [19]. Dans le cas particulier du dopage de type n, on constate que la conductivité du a-Si:H atteint un maximum pour ensuite diminuer avec les forts niveaux de dopage ($N_{\text{PH}_3}/N_{\text{SiH}_4} > 10^{-2}$) [19]. Cette diminution de conductivité peut être interprétée comme une conséquence liée à l'augmentation de la densité d'états des liaisons pendantes et des queues de bandes à ce niveau de dopage [47].

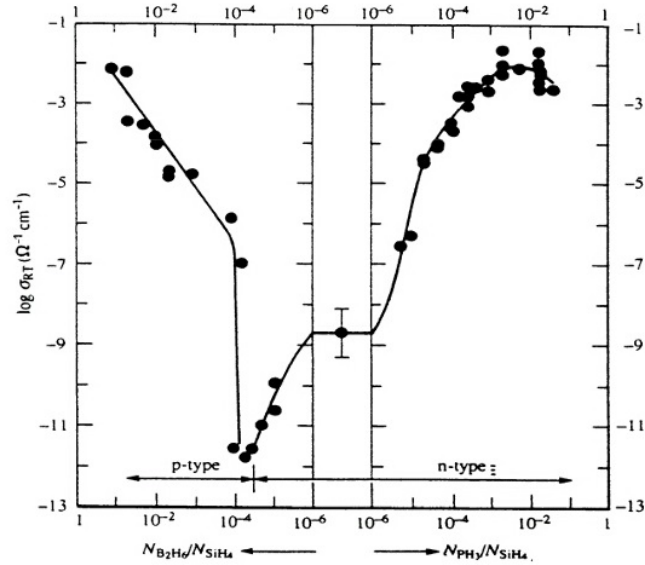


Figure 2.6 – Variation de la conductivité à température ambiante σ_{RT} du a-Si:H de type n et de type p, en fonction des rapports N_{PH_3}/N_{SiH_4} et $N_{B_2H_6}/N_{SiH_4}$ respectivement [19].

Toutefois, même si le dopage est rendu possible dans le a-Si:H, son efficacité reste malgré tout limitée. Si N est la densité de dopants alors la densité des porteurs pouvant être créés dans le a-Si:H est de l'ordre de $N^{1/2}$. Par conséquent, les conductivités de type n et de type p du a-Si:H restent bien inférieures à celles du c-Si. Il faut préciser que la conductivité du a-Si:H dépend également des paramètres de dépôts comme la pression, la température, la puissance radio-fréquence et la géométrie de la chambre à plasma.

2.7.2 Configurations des atomes dopants dans le a-Si:H

La Figure 2.7 représente les différentes configurations possibles d'un atome dopant de phosphore dans le a-Si:H. Quand un atome de valence N est incorporé au sein d'un réseau aléatoire continu, il adopte une coordination Z prédite par la règle « 8-N » introduite par Mott en 1968 et selon laquelle :

$$\begin{aligned} Z &= 8 - N & \text{pour } N &\geq 4 \\ Z &= N & \text{pour } N < 4 \end{aligned} \quad (2.30)$$

Dans le a-Si:H, un atome de phosphore dont la valence est 5 adoptera principalement une coordination de 3 illustrée à la Figure 2.7a. Cependant, cette configuration notée P_3^0 représente un état non dopant et donc inactif électriquement. Le dopage effectif du a-Si:H est réalisé grâce à une petite fraction d'atomes de phos-

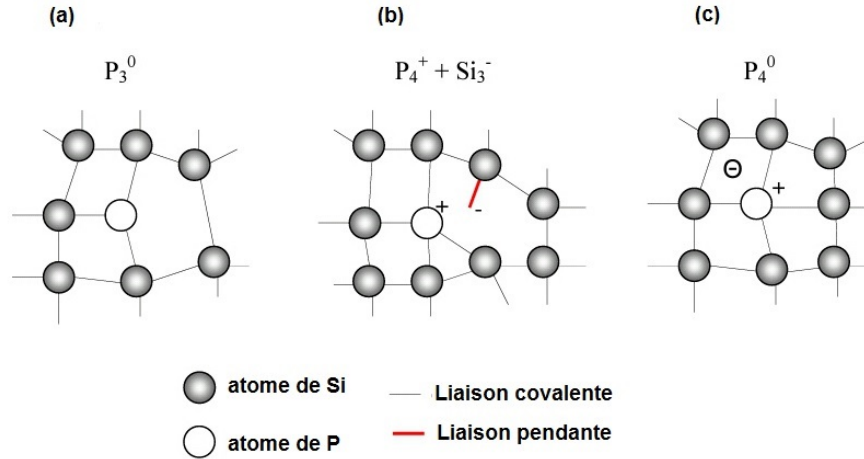


Figure 2.7 – Types de configurations de l'atome de phosphore au sein du réseau du a-Si:H : (a) non dopante P_3^0 , (b) état donneur compensé par le défaut $P_4^+ + Si_3^-$, (c) atome neutre P_4^0 [39].

phore adoptant plutôt la coordination de 4. Ces atomes peuvent être incorporés dans le réseau sous forme d'atomes donneurs neutres P_4^0 comme dans le cas du c-Si (cf. Figure 2.7c). Cependant, cette configuration possède une énergie trop grande et de ce fait demeure instable au sein du réseau aléatoire continu. Ce sont les atomes de phosphore chargés P_4^+ qui contribuent au dopage effectif du a-Si:H, c'est-à-dire à un rapprochement du niveau de Fermi E_F de la bande de conduction. La formation des états chargés P_4^+ s'accompagne de la création de liaisons pendantes chargées négativement Si_3^- , comme illustrée à la Figure 2.7b. La configuration P_4^+ et Si_3^- est plus favorable énergétiquement que la configuration P_4^0 et elle est appelée « donneur compensé par le défaut ». D'autre part, les électrons libérés par certains atomes P_4^+ iront également occuper les états de queues de bandes au lieu des états étendus. En effet, les électrons des atomes donneurs iront préférentiellement dans les états de « la queue d'Urbach », énergétiquement plus basse que la bande de conduction. Ces états ont pour effet de limiter l'efficacité des atomes dopants. En pratique, le niveau de Fermi ne peut s'approcher du bord de mobilité de bande de conduction qu'à moins de 0,15 eV pour du a-Si:H dopé au phosphore [39]. Tous les mécanismes liés au dopage de type n s'appliquent également au dopage de type p. La configuration qui correspond à un dopage effectif de type p du a-Si:H est $B_4^- - Si_3^+$. Seulement, du fait que la queue de bande de valence est plus large que celle de la bande de conduction, l'efficacité du dopage de type p est réduite par rapport à celle du dopage de type n et le niveau de Fermi ne peut s'approcher du bord de mobilité de bande de valence qu'à moins de 0,3 eV.

Il a été montré expérimentalement que la densité d'états dans la bande interdite du a-Si:H augmente en fonction du dopage, en particulier celle des liaisons pendantes qui varie comme la racine carrée du dopage. Ce phénomène a été expliqué avec succès

par le modèle d'auto-compensation de Street. On estime que la densité de défauts du a-Si:H dopé est deux ou trois fois plus grande que celle du a-Si:H intrinsèque. Dans cette situation, les longueurs de diffusion des porteurs de charge deviennent beaucoup trop faibles dans les couches dopées, de l'ordre de 100 nm, et par conséquent les structures pn conventionnelles ne sont pas envisageables dans le cas des cellules solaires en couches minces à base a-Si:H. En effet, les paires électrons-trous photogénérées dans de telles structures se recombineraient avant même de pouvoir être collectées. La solution est le recours aux structures de type p-i-n ou de type n-i-p, où « i » représente une couche intrinsèque de a-Si:H comprise entre les couches dopées p et n. La couche intrinsèque constitue la couche active de la cellule ou encore appelée « absorbeur », où ont lieu principalement l'absorption de la lumière et la photogénération des porteurs [39]. Les couches dopées quant à elles vont établir le champ électrique interne à travers la couche intrinsèque qui est chargé de collecter les paires électron-trou photogénérées dans celle-ci [65], et cela de manière beaucoup plus efficace comparé à la diffusion. Comme le transport électronique est assuré principalement par la dérive, les cellules solaires à structure p-i-n (ou n-i-p) constituent des dispositifs à dérive alors que celles basées sur les structures pn représentent des dispositifs à diffusion. C'est en 1976 que Carlson et Wronski [10] furent parmi les premiers à fabriquer des cellules p-i-n à base de a-Si:H, utilisées quelques années plus tard par Sanyo dans les calculatrices. Les premiers rendements initiaux n'étaient que de 2-3% mais ils ont rapidement progressé pour atteindre 12-14% en 1989. Aujourd'hui, les cellules solaires en technologie couches minces à base de a-Si:H ont atteint un stade de maturité.

2.7.3 Distribution des atomes dopants dans le gap de mobilité du a-Si:H

En raison de la nature amorphe du silicium amorphe hydrogéné, les atomes dopants occupent plusieurs niveaux distribués énergétiquement autour d'un niveau proche de la bande de conduction et de la bande de valence pour les dopages de type n et de type p, respectivement. En supposant que les atomes dopants se comportent comme des pièges très proches d'une des bandes avec une distribution gaussienne centré autour du niveau E_D (états donneurs) ou E_A (états accepteurs), les taux d'ionisation sont donnés par les expressions suivantes [50] :

- **Etats donneurs :**

$$N_D^+ = \frac{N_D}{\sigma_D \sqrt{2\pi}} \int_{E_V}^{E_C} \exp\left(-\frac{(E - E_D)^2}{2\sigma_D^2}\right) f_D(E) dE \quad (2.31)$$

- Etat accepteurs :

$$N_A^- = \frac{N_A}{\sigma_A \sqrt{2\pi}} \int_{E_V}^{E_C} \exp\left(-\frac{(E - E_A)^2}{2\sigma_A^2}\right) f_A(E) dE \quad (2.32)$$

où $f_D(E)$ et $f_A(E)$ représentent les fonctions d'occupation des états donneurs et accepteurs respectivement, σ_D et σ_A sont les déviations standards des deux distributions gaussiennes relatives aux états donneurs et accepteurs respectivement.

$$f_D(E) = \frac{c_p p + c_n n_1(E)}{c_p(p + p_1(E)) + c_n(n + n_1(E))} \quad (2.33)$$

$$f_A(E) = \frac{c_n n + c_p p_1(E)}{c_p(p + p_1(E)) + c_n(n + n_1(E))} \quad (2.34)$$

où c_n et c_p sont les coefficients de capture pour les électrons et les trous respectivement.

2.8 Le silicium microcristallin hydrogéné

2.8.1 Histoire du silicium microcristallin hydrogéné

Les couches de silicium microcristallin hydrogéné ($\mu\text{c-Si:H}$) ont été produites pour la première fois par Veprek et Marecek en 1968 à Prague, à l'aide du procédé PECVD à basse température [66]. Puis en 1979, Usui et Kikuchi ont prouvé que le dopage du $\mu\text{c-Si:H}$ était faisable et beaucoup plus facile que le dopage du a-Si:H [67]. Cependant, les couches microcristallines intrinsèques obtenues à cette époque étaient de mauvaise qualité et possédaient nativement une conductivité de type n. Par conséquent, il n'était pas possible de s'en servir comme couche active dans les cellules solaires. Ce n'est que bien plus tard, en 1996, que J. Meier et al, de l'Université de Neuchâtel, ont réalisé avec succès une cellule solaire de type p-i-n entièrement en $\mu\text{c-Si:H}$ grâce à l'utilisation d'un gaz purifiant. Ce dernier, en réduisant la teneur en oxygène dans la phase gazeuse à l'intérieur du réacteur PECVD, a permis le dépôt de véritables couches intrinsèques de $\mu\text{c-Si:H}$ [68]. Les cellules solaires à base de $\mu\text{c-Si:H}$ ainsi élaborées ont pu atteindre des records de conversion de l'ordre de 7,7%.

2.8.2 Microstructure du silicium microcristallin

Le $\mu\text{-Si:H}$ est un matériau complexe qui présente une grande variété de microstructures dépendant autant des conditions de dépôt que de la nature du substrat [69]. Il s'agit d'un matériau biphasé en raison de sa structure composée de microcristaux noyés dans une phase amorphe [62]. Ce matériau peut être obtenu avec les procédés de dissociation du silane assisté par plasma (PECVD) ou par résistance chauffante (HWCVD). C'est en augmentant la quantité d'hydrogène pendant le dépôt que l'on peut faire croître du $\mu\text{-Si:H}$. La croissance d'une couche de ce matériau commence d'abord par une couche de silicium amorphe (a) et se poursuit par une transition de phase. Des cristallites apparaissent d'abord ($a \rightarrow a+\mu\text{c}$) ensuite la couche microcristalline prend forme ($(a+\mu\text{c}) \rightarrow \mu\text{c}$) et évolue en fonction du temps de dépôt. La Figure 2.8 représente schématiquement l'évolution de la structure microcristalline en fonction du rapport de dilution d'hydrogène $R=[\text{H}_2]/[\text{SiH}_4]$ [70]. Elle se compose de conglomérats, en forme de crayons d'environ un demi-micromètre de diamètre, composés de nanocristaux ayant un diamètre de quelques dizaines de nanomètres [69]. C'est pourquoi que le silicium microcristallin est aussi appelé silicium nanocristallin (nc-Si). En jouant sur les conditions de dépôt (température, puissance, pression) et la dilution d'hydrogène dans le silane, la cristallinité de la couche déposée peut être contrôlée [38].

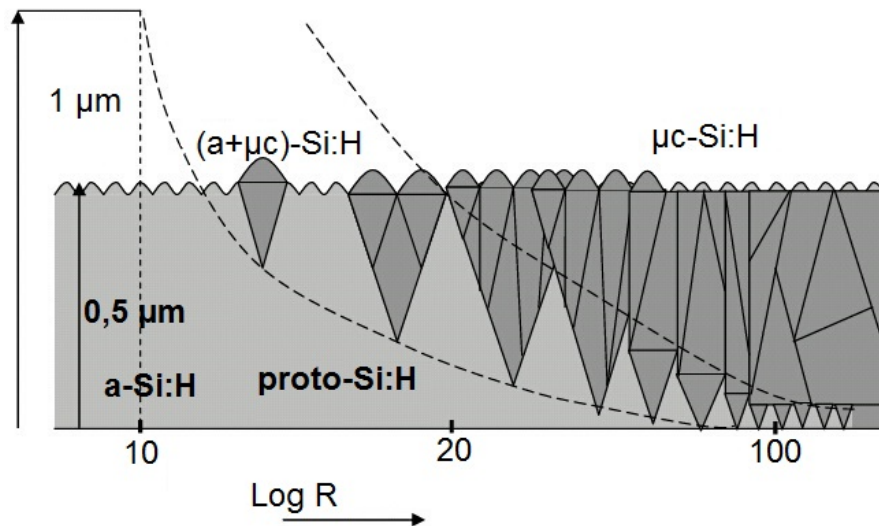


Figure 2.8 – Evolution de la structure microcristalline en fonction du rapport de dilution d'hydrogène $R=[\text{H}_2]/[\text{SiH}_4]$ [70, 71].

La croissance du $\mu\text{-Si:H}$ peut être aussi réalisée en alternant les dépôts de a-Si:H et les plasmas d'hydrogène [72]. En utilisant cette technique de déposition, appelée LBL (Layer By Layer), J. Jang [73] donne une explication du rôle attribué à l'hydrogène dans la croissance d'une couche microcristalline.

En mesurant la concentration d'hydrogène dans les couches, il en déduit que la phase de croissance se déroule essentiellement en deux étapes :

1. la couche a-Si:H est tout d'abord « imbibée » d'hydrogène, il y a relaxation du matériau (i.e. rupture des liaisons Si-Si faibles en faveur de liaisons Si-H plus fortes jusqu'à saturation). Jusqu'ici, la structure est toujours amorphe.
2. une fois le réseau relaxé, les liaisons Si-H se brisent pour reformer des liaisons Si-Si fortes en relâchant l'hydrogène sous forme moléculaire. La structure devient alors microcristalline.

La Figure 2.9 illustre le réseau atomique du $\mu\text{c-Si:H}$ qui est caractérisé par un ordre à longue distance.

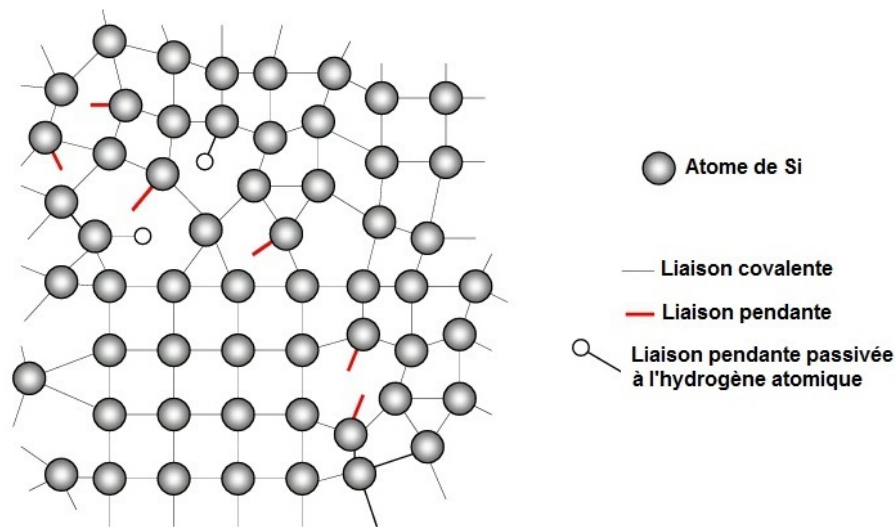


Figure 2.9 – Représentation schématique du réseau atomique du silicium microcristallin hydrogéné ($\mu\text{c-Si:H}$) [39].

2.8.3 Propriétés optoélectroniques du $\mu\text{c-Si:H}$

Les caractéristiques optiques du $\mu\text{c-Si:H}$ sont différentes de celles du a-Si:H et proches de celles du c-Si. Il s'agit d'un semiconducteur à gap indirect dont la valeur est de l'ordre de 1,1 eV [74] et possédant une bonne absorption dans le proche infrarouge comme on peut le voir sur la Figure 2.5 [74, 75]. Au-delà de 1,8 eV, dans le visible, son coefficient d'absorption devient plus grand que celui du c-Si mais reste inférieure à celui du a-Si:H [74].

La conception de cellules solaires à base de $\mu\text{c-Si:H}$ repose sur la configuration p-i-n ou n-i-p [76] puisque la longueur de diffusion des porteurs dans ce matériau est également faible [76]. D'autre part, en raison du faible coefficient d'absorption du $\mu\text{c-Si:H}$, la couche active doit être plus épaisse, 1 à 4 μm , et par conséquent la

vitesse de dépôt devient un paramètre critique pour réduire le coût de production. L'avantage avec le $\mu\text{c-Si:H}$ est qu'il n'est pas sujet à l'effet SWE. Avec plus de 60 % de fraction cristalline, les couches de $\mu\text{c-Si:H}$ sont considérées comme stables sous éclairage [77]. Toutes ces propriétés font du $\mu\text{c-Si:H}$ une alternative au a-SiGe:H dans les structures à multijonction [78] que nous verrons dans le chapitre 4 .

Quant au dopage du $\mu\text{c-Si:H}$, il est plus efficace comparé au a-Si:H et n'engendre pas de défauts supplémentaires dans la structure. Les couches à base de $\mu\text{c-Si:H}$ peuvent être fortement dopées, ce qui permet de réaliser des contacts ohmiques pour les cellules solaires et les transistors à couches minces [79].

2.9 Conclusion

Le a-Si:H est obtenu par la dissociation du gaz silane SiH_4 au moyen des techniques PECVD ou HWCVD. Il possède une structure désordonnée décrite par un réseau aléatoire où l'on observe un ordre à courte distance et un désordre à grande distance. Il a été montré que l'ordre à courte distance peut suffire à créer une structure de bande. Le désordre dans le a-Si:H fait apparaître des états localisés (DOS : Density Of State) dans la bande interdite à savoir :

- les queues de bandes : elles sont associées aux distorsions de liaisons covalentes. Elles sont localisées près des bords de bandes de conduction et de valence et sont modélisées par deux exponentielles décroissantes.
- les liaisons pendantes : elles sont associées aux liaisons Si-Si insatisfaites. Il s'agit de défauts profonds localisés au milieu de la bande interdite. Elles sont modélisées par deux gaussiennes séparées par une énergie de corrélation ou énergie de Hubbard.
- Les états pièges discrets : ils proviennent de l'introduction intentionnelle ou non d'impuretés dans le matériau.

La passivation à l'hydrogène des liaisons pendantes permet une réduction significative de la densité de défauts dans le silicium amorphe. Celle-ci est de l'ordre de 10^{15} cm^{-3} dans le a-Si:H de qualité solaire. Il en résulte une amélioration de la conductivité ainsi que de la photoconductivité du matériau. Cette passivation a rendu possible le dopage du silicium amorphe. En raison du caractère métastable inhérent au a-Si:H , la densité des liaisons pendantes augmente sous illumination jusqu'à atteindre un état stable. Ce phénomène, appelé l'effet Staëbler-Wronski (ou SWE), est à l'origine de la diminution des rendements des cellules solaires à base

de a-Si:H. Dans ce cas, il y a lieu de distinguer entre le rendement initial et le rendement stabilisé de la cellule solaire qui correspondent au rendement avant et après illumination.

Le a-Si:H est un semiconducteur à un gap direct. En raison de son fort coefficient d'absorption dans la partie du visible du spectre solaire, il constitue un très bon candidat pour les cellules solaires en couches minces. Il faut savoir que dans celui-ci, la notion de gap de mobilité est différente de celle du gap optique. Le gap de mobilité est défini par les bords de mobilité de bande de valence et de bande de conduction. Il est difficilement mesurable. Quant au gap optique, il est obtenu en mesurant l'énergie correspondant à un coefficient d'absorption égale à 10^4 cm^{-1} ou à partir des extrapolations de la courbe d'absorption en fonction de l'énergie. Il est légèrement plus faible que le gap de mobilité et se situe entre 1,7 et 1,8 eV.

Le dopage du a-Si:H est réalisé en utilisant de gaz dopants comme la phosphine PH_3 pour le dopage de type n et le diborane B_2H_6 pour le dopage de type p. Toutefois, l'efficacité du dopage dans le a-Si:H reste limitée et les conductivités de type n et de type p sont bien inférieures à celles du c-Si. Ce sont les configurations $\text{P}_4^+ - \text{Si}_3^-$ dans le cas des atomes de phosphore et $\text{B}_4^- - \text{Si}_3^+$ dans le cas des atomes de bore qui donnent lieu à un dopage effectif. Il s'agit du principal mécanisme de dopage dans le a-Si:H qui a été expliqué par le modèle d'autocompensation de Street. Cependant, le niveau de Fermi ne peut approcher le bord de mobilité de bande de conduction et de bande de valence à moins de 0,15 eV et de 0,3 eV pour le silicium amorphe dopé au phosphore et au bore respectivement. Il en résulte du dopage, une augmentation de la densité de défauts notamment celle des liaisons pendantes. Cela se répercute sur les longueurs de diffusion des porteurs dans les couches dopées qui deviennent plus faibles. C'est la raison pour laquelle les cellules solaires à base de a-Si:H sont des dispositifs de type dérivé qui reposent sur les configurations p-i-n ou n-i-p que nous verrons plus en détails dans le chapitre 3.

En augmentant la quantité d'hydrogène dans le mélange gazeux à base de SiH_4 , on parvient à obtenir une forme cristalline du a-Si:H appelée le silicium microcristallin hydrogéné ($\mu\text{c-Si:H}$). Il s'agit d'un matériau biphasé en raison de sa structure composée de microcristaux noyés dans une phase amorphe. Le réseau atomique du $\mu\text{c-Si:H}$ est caractérisé par un ordre à grande distance. Les caractéristiques de ce matériau sont proches de celles du c-Si puisque son gap est indirect et dont la valeur est de l'ordre de 1,1 eV. Il possède une bonne absorption dans le proche infrarouge.

La densité des défauts est plus faible comparée à celle du a-Si:H mais la longueur de diffusion des porteurs demeure toujours faible. Par conséquent, les cellules solaires à base de $\mu\text{c-Si:H}$ sont basées aussi sur les configurations p-i-n ou n-i-p. Les couches actives doivent avoir de fortes épaisseurs entre 1 à 4 μm et cela en raison

du faible coefficient d'absorption du $\mu\text{c-Si:H}$. Ce matériau ne montre pas de signes de dégradation liés à l'effet Staëbler-Wronski. Son dopage est plus efficace et il est possible de réaliser des couches fortement dopées. En plus, il n'occasionne pas de défauts supplémentaires dans la structure. Les cellules solaires à base de $\mu\text{c-Si:H}$ sont utilisées avantageusement en combinaison avec des cellules à base de a-Si:H dans les structures à multijonction qui feront l'objet du chapitre 4.

Architecture des cellules solaires en couches minces de silicium

Dans ce chapitre, nous nous intéresserons à l'architecture des cellules solaires à simple jonction à base de a-Si:H et de μ c-Si:H. Nous verrons d'abord leurs différentes configurations, après quoi nous parlerons de la notion de couche fenêtre correspondant à la couche avant des cellules. Puis, nous décrirons le principe de fonctionnement des cellules solaires à simple jonction. Nous aborderons ensuite les matériaux à partir desquels sont élaborées leurs électrodes. La dernière partie de ce chapitre sera consacrée aux techniques de dépôts des différentes couches de matériaux de cellules solaires.

3.1 Architecture des cellules solaires en couches minces de silicium

Les cellules solaires à base de a-Si:H et μ c-Si:H sont issues de la technologie de couches minces en silicium (Thin-Film Silicon). Dans cette technologie, on distingue essentiellement deux configurations de cellules solaires à savoir :

- les structures de type p-i-n ou encore appelée configuration « superstrat » ;
- les structures de types n-i-p ou encore appelée configuration « substrat ».

L'appellation de structure p-i-n ou de structure n-i-p rend compte de l'ordre dans lequel les différentes couches composant les cellules solaires sont empilées sur le substrat lors du processus de fabrication. Dans ces structures, seul le matériau actif d'un point de vue photovoltaïque est la couche intrinsèque (i). En effet, l'absorption de la lumière et la photogénération des porteurs ont lieu principalement dans cette

couche appelée couche active ou absorbeur. Quant aux couches dopées, elles servent à établir le champ interne à travers la couche active. Ce champ doit être suffisamment fort afin de garantir la collecte des porteurs photogénérés. Son intensité dépend à la fois du niveau de dopage des couches dopées et de l'épaisseur de la couche active. D'autre part, les couches n et p permettent d'assurer un bon contact électrique à faible perte ohmique entre la cellule et les électrodes externes. Il est également nécessaire de réduire au mieux leur épaisseur afin de minimiser les pertes optiques et électriques dans la cellule solaire [39].

3.1.1 Structure des cellules solaires à simple jonction

Les cellules solaires en couches minces de silicium utilisent une large variété de substrats [39]. Dans la configuration « superstrat », la cellule solaire à simple jonction p-i-n à base de a-Si:H (cf. Figure 3.1a) ou de $\mu\text{c-Si:H}$ (cf. Figure 3.1b) est déposée sur un substrat en verre ou tout autre matériau transparent. Ce dernier recouvert d'une couche d'oxyde conducteur transparent ou TCO (Transparent Conductive Oxyde) constitue le contact avant à travers lequel la lumière pénètre en premier dans la cellule solaire.

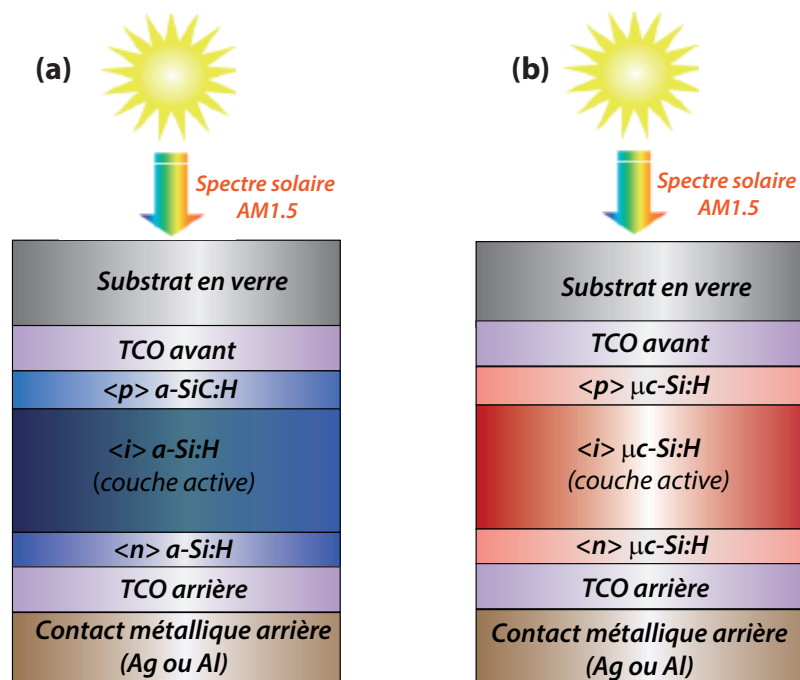


Figure 3.1 – Structure d'une cellule solaire à simple jonction à configuration superstrat ou p-i-n à base de : (a) a-Si:H (b) $\mu\text{c-Si:H}$.

Quant au contact arrière de la cellule, il est formé d'un TCO arrière recouvert d'une métallisation généralement à base d'argent (Ag) ou d'aluminium (Al) [9]. Cette métallisation sert de contact électrique (ou électrode) pour la cellule solaire

ou pour la mise en série de cellules solaires individuelles. D'autre part, elle fait office de miroir arrière permettant de réfléchir la lumière n'ayant pas été absorbée par la cellule lors de son premier passage. La réflexion de la lumière permet d'accroître la probabilité d'absorption des photons dans la couche active et ainsi d'augmenter sensiblement la densité de courant [62] et du coup le rendement de la cellule. Le TCO arrière agit comme une barrière anti-diffusion pour réduire les problèmes de contamination de la cellule dus à la métallisation arrière [80].

Dans la configuration « substrat », le substrat est opaque tel que l'acier inoxydable, l'aluminium ou certains films plastiques, et contrairement à la configuration superstrat, il constitue la face arrière de la cellule. Si le substrat utilisé est en film plastique, comme illustré à la Figure 3.2, le dépôt successif des couches semiconductrices n,i et p s'effectue après avoir déposé sur le substrat un contact arrière formé d'une couche de métallisation en Ag (ou Al) et d'une couche de TCO. De plus, pour assurer une bonne adhésion avec le substrat, une couche de chrome (Cr) est déposée avant la métallisation [9].

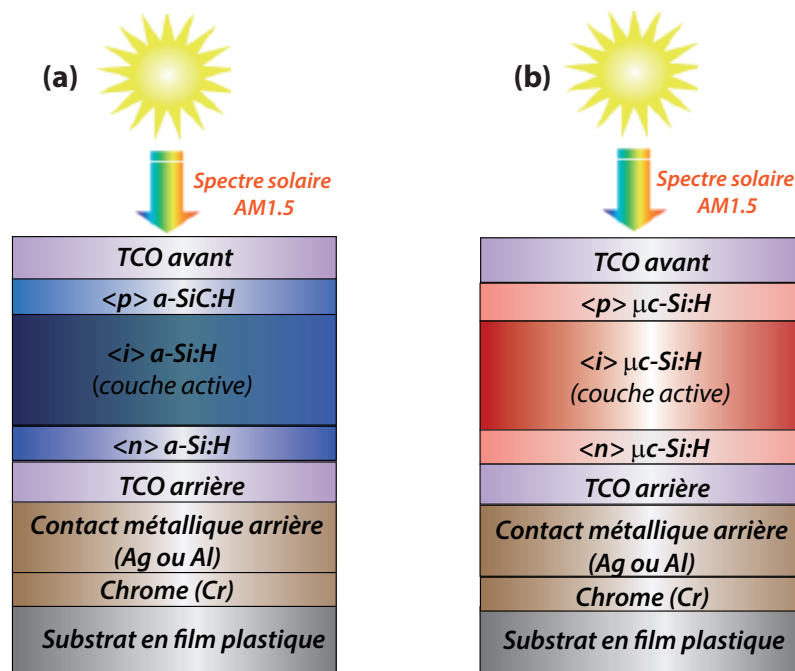


Figure 3.2 – Structure d'une cellule solaire à simple jonction à configuration substrat ou n-i-p à base de : (a) a-Si:H (b) $\mu\text{c-Si:H}$.

En revanche, si le substrat est un matériau suffisamment conducteur tel que l'acier ou l'aluminium, il est possible de déposer la jonction n-i-p directement sur le substrat sans avoir recours à une métallisation ou un TCO arrière [80]. Cependant, cette alternative ne permet pas de connecter les cellules entre-elles pour en faire un module et d'autre part, si le substrat possède de faibles propriétés optiques, il faut s'attendre à une réduction substantielle du courant débité par la cellule (diminution

de la réflexion et de la diffusion de la lumière) [62].

Toutefois, quelle que soit la configuration utilisée, superstrat ou substrat, la cellule solaire est toujours éclairée par sa face avant du côté p en raison de la faible mobilité des trous comparée à celle des électrons. En effet en éclairant par la face avant, il se crée une photogénération de porteurs dans la couche active dont le taux au voisinage de l'interface « p-i » est le plus élevé. Par conséquent, le trajet moyen des trous photogénérés jusqu'à l'électrode est réduit, ce qui permet de rendre leur collecte beaucoup plus efficace dans les cellules solaires [39]. En effet, il a été démontré par Deng et Schiff en 2003, que les cellules solaires p-i-n à base de a-Si:H éclairées par leur face p affichaient les rendements de conversion les plus élevés [81].

3.1.2 Couche fenêtre dans les cellules solaires à simple jonction

La face avant de la cellule solaire à base de a-Si:H comporte une couche p en carbure de silicium amorphe hydrogéné (a-SiC:H) plutôt qu'une couche p en a-Si:H, comme cela est illustré à la Figure 3.1a et à la Figure 3.2a. En effet, cette dernière n'est pas appropriée aux cellules solaires à base a-Si:H et cela pour les raisons suivantes [62] :

- la valeur du gap est insuffisante, ce qui peut engendrer des pertes optiques associées à l'absorption des photons dans la couche p ;
- la conductivité de la couche ne permet d'assurer un bon contact avec le TCO avant de la cellule.

C'est au début des années 80 qu'un groupe de chercheurs de l'Université d'Osaka ont montré que la couche p-a-Si:H pouvait être remplacée avantageusement par une couche p-a-SiC:H dans une cellule solaire. Ils ont en effet observé que la cellule présentait de bien meilleures performances et une bonne réponse spectrale dans la région bleu du spectre visible [82]. Dès lors, la couche p carbonée est utilisée en guise de couche supérieure, communément appelée « couche fenêtre », dans les cellules solaires simples jonction et à multijonctions. Elle est en fait caractérisée par un gap optique plus large lui permettant de transmettre un plus grand nombre de photons à la couche active de la cellule et il en résulte une augmentation du rendement de conversion photovoltaïque [83]. Une couche fenêtre idéale est caractérisée par une concentration de porteurs plus élevée que celle de la couche active, une faible résistivité et une mobilité des porteurs élevée [84].

Pour l'élaboration des couches p de a-Si_{1-x}C_x:H, on introduit du gaz méthane CH₄ dans le mélange gazeux (SiH₄, H₂, B₂H₆) à l'intérieur de la chambre de dépôt.

La lettre x représente la teneur en carbone dont la valeur varie linéairement entre 0,1 et 0,3 quand le rapport de débit $\text{CH}_4/(\text{CH}_4+\text{SiH}_4)$ augmente de 0,6 à 0,9. Il se crée alors des liaisons fortes de Si-C au sein du réseau du silicium amorphe hydrogéné ayant pour effet un élargissement du gap presque linéaire de 1,7 eV à 2,3 eV avec x [64]. On assiste également à une augmentation de la densité des défauts avec la teneur en carbone affectant la photoconductivité. Néanmoins, ces défauts sont en partie compensés grâce au dopage des couches carbonées et il en résulte une amélioration de la durée de vie des porteurs et de la photoconductivité [82]. L'énergie d'Urback des couches de $\text{a-Si}_{1-x}\text{C}_x\text{:H}$ est de l'ordre de 50 meV, elle augmente avec la valeur du gap optique et se maintient à une valeur de 90 meV quand celui-ci est supérieur à la valeur de 2,1 eV [85].

L'interface p-i doit faire l'objet d'une attention assez particulière en raison de son influence sur les performances de la cellule solaire. Cette interface est en fait une hétérojonction où se produisent des décalages ou discontinuités (offsets en anglais) de bandes de conduction (ΔE_C) et de bandes de valence (ΔE_V). La discontinuité de bande de valence (ΔE_V) agit comme une barrière de potentiel pour les trous photogénérés empêchant leur migration vers la région p. Comme le taux de génération de porteurs à l'interface p-i est le plus élevé de la couche intrinsèque, il est nécessaire de corriger aussi bien la discontinuité de bande de valence que la discontinuité de bande de conduction afin d'optimiser le champ électrique dans cette région et d'empêcher une rétrodiffusion des électrons photogénérés vers la région p où ils peuvent se recombiner. En général, une couche mince à large gap, de haute qualité, intrinsèque ou faiblement dopé à base de a-Si:H ou de a-SiC:H est insérée à l'interface p-i [86]. Ces couches, appelées couches tampons ou buffers, permettent d'élargir le champ électrique interne, et du coup d'améliorer la tension V_{co} et le facteur de forme FF [87]. C'est ce que nous verrons plus en détails dans le chapitre 4.

En revanche dans les structures solaires p-i-n ou n-i-p à base de $\mu\text{c-Si:H}$, la couche p- $\mu\text{c-Si:H}$ convient parfaitement à la cellule solaire microcristalline pour faire office de couche fenêtre. En effet, elle est caractérisée par une faible absorption optique dans la gamme des courtes longueurs d'onde du visible et par une faible énergie d'activation. Elle est de bonne qualité et possède une conductivité électrique élevée, ce qui permet de réduire les résistances séries dans la cellule solaire [88]. D'autre part, le problème de discontinuités à l'interface p-i ne se pose pas puisque celle-ci est une homojonction.

3.1.3 Principe de fonctionnement d'une cellule solaire à simple jonction p-i-n ou n-i-p

Comme nous l'avons mentionné dans le chapitre 2, le concept de jonction PN ne peut s'appliquer aux cellules solaires à base de a-Si:H (ou de $\mu\text{-Si:H}$) en raison de la faible longueur de diffusion des porteurs minoritaires dans les couches dopées n et p. De ce fait, ces cellules solaires sont basées sur les structures p-i-n ou n-i-p dans lesquelles le mécanisme de transport dominant des porteurs est de type dérivate. La couche intrinsèque intercalée entre les couches dopées n et p est la couche où a lieu principalement la photogénération de paires électron-trou quand la cellule est sous éclairage. Quant aux couches p et n, elles servent à établir le champ électrique à travers la couche intrinsèque qui permettra de séparer les porteurs photogénérés de sorte que les électrons iront migrer vers la couche n et les trous vers la couche p où ils seront collectés par les électrodes. Les couches dopées permettent également d'assurer un bon contact ohmique avec les électrodes et leur épaisseur doit être la plus faible possible afin de limiter les pertes optiques [39].

En pratique, le champ électrique n'est pas uniforme dans la couche intrinsèque de a-Si:H. Son profil est fortement affecté par la densité des défauts présente dans cette région. L'intensité du champ électrique est plus forte au voisinage des interfaces « p-i » et « i-n » où est localisée une grande quantité de défauts alors qu'elle est plus faible dans la couche intrinsèque. La distribution non uniforme du champ électrique affecte le transport des charges et les performances des cellules solaires [81].

La Figure 3.3a et la Figure 3.3b représentent les diagrammes de bande d'une jonction PN à base de c-Si et une jonction p-i-n à base de a-Si:H, respectivement. Ces diagrammes montrent la différence entre les deux cellules solaires, l'une de type diffusion et l'autre de type dérivate.

3.2 Les TCO dans les cellules solaires en couches minces de silicium

En plus d'être conductrice, l'électrode avant d'une cellule solaire doit être transparente. Elle est alors conçue à base d'oxydes métalliques appelées oxydes transparents conducteurs ou TCO, qui ont la particularité d'allier ces deux propriétés antagonistes, à savoir une bonne transparence couplée à une conductivité électrique satisfaisante. En effet, les TCO sont caractérisés par un gap élevé, de l'ordre de 3 à 4 eV, ce qui les rend transparents dans le domaine du visible. Pour être conducteurs, un excès d'électrons est introduit dans ces oxydes soit en créant des défauts

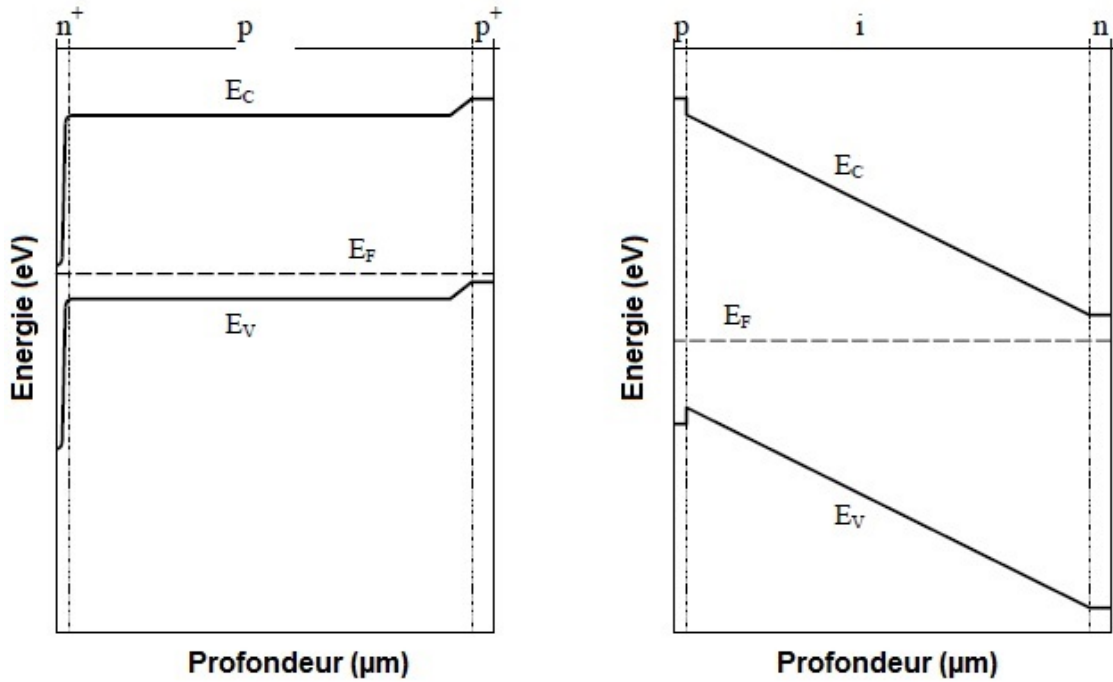


Figure 3.3 – Diagramme de bande d’une cellule solaire : (a) PN à base de c-Si (b) simple jonction p-i-n à base de a-Si:H (d’après [39]).

de structure, soit en procédant à un dopage approprié. Il en résulte des semiconducteurs dégénérés de type n dont les électrons doivent être caractérisés par une haute mobilité et une faible masse effective [89].

Outre les propriétés de conductivité et de transparence, une troisième propriété importante est recherchée dans un matériau TCO qui est sa capacité à diffuser la lumière [90]. Dans les cellules solaires en couches minces, pour que la lumière soit absorbée sur une faible épaisseur de la couche active, il ne s’agit pas seulement d’utiliser des matériaux très absorbants, mais c’est également d’avoir recours à la texturation des cellules. Cette texturation consiste à utiliser un TCO rugueux qui a la capacité de diffuser la lumière, comme illustré à la Figure 3.4, et ainsi d’augmenter son chemin optique moyen dans la couche active pour obtenir une plus grande probabilité d’absorption [60]. Ce sont en fait les nanostructures présentes à la surface du TCO qui sont responsables de la diffusion de la lumière [91]. De plus, l’amplitude de cette diffusion varie en fonction de la longueur d’onde des photons qui traversent le TCO rugueux.

On utilise souvent un paramètre appelé facteur de haze pour exprimer la faculté d’un matériau à diffuser la lumière, que ce soit en transmission ou en réflexion. Celui-ci est égale à la part du rayonnement diffusé, par opposition à la part non

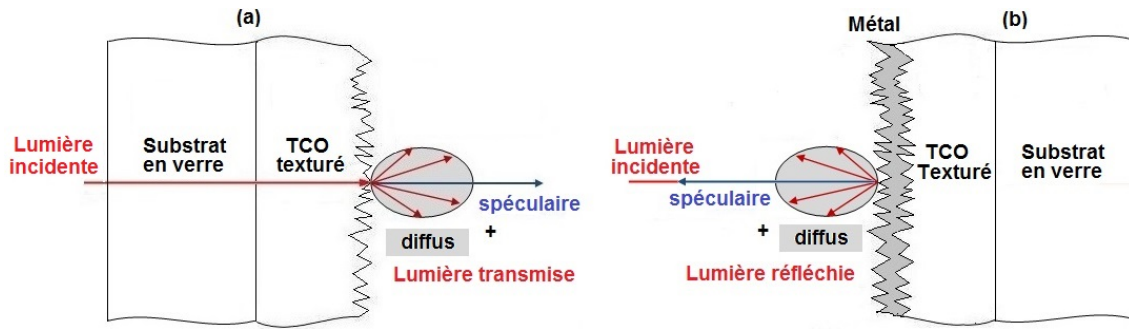


Figure 3.4 – Part du rayonnement diffusé (haze parameter) : (a) en transmission (b) en réflexion (d’après [92]).

diffusée dite spéculaire, selon l’équation (3.1) :

$$\text{Haze} = \text{diffus} / (\text{diffus} + \text{spéculaire}) \quad (3.1)$$

La valeur du facteur Haze dépend en général de la longueur d’onde et des dimensions caractéristiques des rugosités de surface [60].

3.2.1 Les matériaux TCO utilisés pour les électrodes transparentes des cellules solaires

Les TCO comme l’oxyde d’indium dopé à l’étain (ou l’ITO pour Indium Tin Oxide) et l’oxyde d’étain ont été longtemps utilisés comme électrodes transparentes pour les cellules solaires. Depuis les années 80, un troisième TCO est de plus en plus utilisé, il s’agit de l’oxyde de zinc [93]. Dans cette partie, nous nous proposons de décrire brièvement ces différents matériaux TCO.

3.2.1.1 L’oxyde d’indium dopé à l’étain

L’oxyde d’indium dopé à l’étain ($\text{In}_2\text{O}_3:\text{Sn}$) ou l’ITO est actuellement le TCO le plus largement utilisé dans l’industrie puisqu’il offre de loin le meilleur compromis de conductivité-transparence et une forte mobilité électronique (jusqu’à $100 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$). Déposé par pulvérisation (ou sputtering en anglais), ce semiconducteur à grand gap (3,7 eV) présente une conductivité d’environ $10^{-4} \Omega \cdot \text{cm}$ et une transparence dans le visible de l’ordre de 90 % [94]. En dépit de ses hautes qualités optoélectroniques, l’ITO souffre de plusieurs défauts. En plus d’être fragile mécaniquement, ses propriétés sont fortement dégradées par les procédés impliquant un plasma d’hydrogène [95], ce qui interdit son utilisation en tant qu’électrodes dans les cellules solaires à base de silicium amorphe hydrogéné. Il est naturellement lisse, et malgré

les traitements d'attaques chimiques, il ne peut être rendu rugueux. L'inconvénient majeur de l'ITO réside dans l'un de ses principaux constituants, l'indium, un métal rare et non renouvelable qui, avec la production massive des écrans plats et des cellules solaires, a vu son prix s'envoler [94]. Il est donc nécessaire de rechercher des alternatives à l'ITO afin de satisfaire les besoins à long terme en matière de TCO, et dont les propriétés doivent s'adapter aux besoins spécifiques. Dans ces perspectives, les TCO tels que l'oxyde d'étain et l'oxyde de zinc s'avèrent très prometteurs [96].

3.2.1.2 L'oxyde d'étain

L'oxyde d'étain (SnO_2) est un matériau semiconducteur à large gap direct de 3,6 eV dont les principaux dopants pour réaliser des TCO sont les éléments Sb, F et Cl. En particulier, l'oxyde d'étain dopé au fluor ou FTO (Fluorine-doped Tin Oxide) est un TCO très prometteur du fait de ses qualités optoélectroniques très satisfaisantes [97]. Les performances électriques des SnO_2 restent néanmoins inférieures à celles de l'ITO, leur résistivité est de l'ordre de $10^{-3} \Omega \cdot \text{cm}$ [94, 98]. Ils sont appréciés en revanche pour leur bonne stabilité thermique et chimique, leur bonne résistance mécanique et leur faible coût associé à des éléments abondants de la croûte terrestre. Ils peuvent être facilement réalisés en grandes surfaces grâce à une méthode de dépôt appelée pulvérisation pyrolytique. De plus, ils sont naturellement rugueux, ce qui leur donne un pouvoir diffusant de la lumière.

Le FTO est largement utilisé comme contact avant pour les cellules solaires p-i-n à simple jonction à base de silicium amorphe hydrogéné. En revanche, il ne convient pas aux cellules solaires tandem en raison de son faible facteur haze pour les longueurs d'ondes supérieures à 700 nm [99]. Il ne peut pas non plus servir de TCO pour les cellules solaires à base de silicium microcristallin hydrogéné vu son instabilité au plasma riche en hydrogène [100, 101].

3.2.1.3 L'oxyde de zinc

L'oxyde de zinc (ZnO) et ses dérivés font l'objet de nombreuses études portant sur la synthèse d'un matériau TCO susceptible de remplacer l'ITO. Le ZnO est un semiconducteur à large gap de 3,37 eV dont les principaux dopants sont les éléments B, Al, Ga et In. C'est en particulier l'aluminium qui réalise le meilleur dopage dans le ZnO , jusqu'à $8,1020 \text{ cm}^{-3}$ porteurs [102]. Les couches minces d'oxyde de zinc dopé à l'aluminium ZnO:Al ou AZO (Aluminium-doped Zinc Oxide) sont déposées par la technique de pulvérisation cathodique magnétron en radiofréquence.

Ces couches possèdent de bonnes performances électriques, soit une résistivité de 2 à $3 \times 10^{-4} \Omega \cdot \text{cm}$, et une transparence dans le visible et le proche infrarouge de 85 à 90 % [94, 103]. Ces performances optoélectroniques sont légèrement inférieures à celles de l'ITO.

L'AZO ne contient aucun métal rare, n'est pas toxique et ses composants sont présents en abondance dans la croûte terrestre [94]. De plus, il résiste parfaitement à la réduction de l'hydrogène, ce qui le rend compatible avec les procédés de dépôt du a-Si:H et du $\mu\text{c-Si:H}$ [95]. Ce matériau TCO n'est pas naturellement rugueux comme le SnO_2 (cf. Figure 3.5a) mais il est possible de texturer sa surface en lui faisant subir un traitement d'attaque chimique. La Figure 3.5b illustre un exemple de texturation de surface obtenue en utilisant de l'acide chlorhydrique très dilué (0,5 %), où la rugosité atteint plusieurs dizaines de nm.

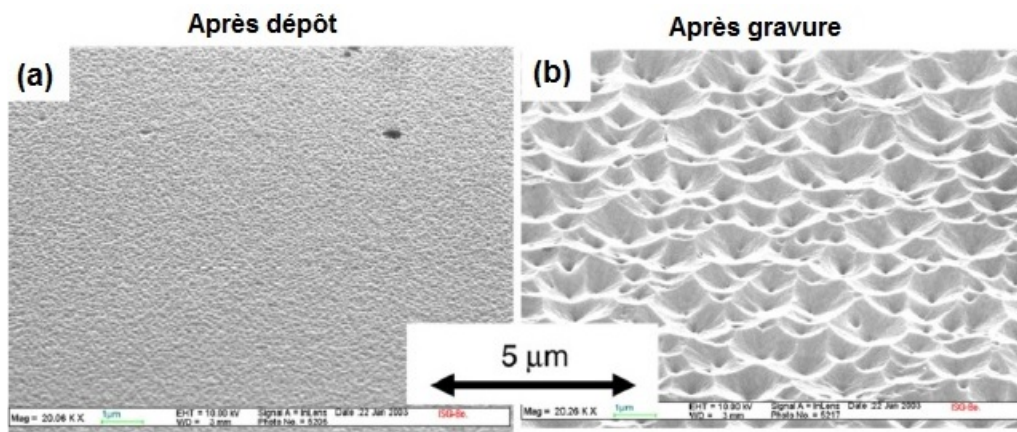


Figure 3.5 – Photos MEB d'une couche de ZnO:Al (a) avant gravure (b) après gravure par une solution d'acide chlorhydrique (0,5%) [101].

Les propriétés de diffusion du ZnO:Al gravé (facteur de haze) se rapprochent de celles des substrats de $\text{SnO}_2:\text{F}$ Asahi, souvent cités comme référence. Les cellules de a-Si:H déposées sur AZO gravé montrent une nette amélioration de leur efficacité quantique par rapport à celles déposées sur substrat lisse, notamment dans la gamme 500-650 nm [104]. Si le ZnO peut être facilement gravé, il est aussi chimiquement instable sous les conditions atmosphériques. Par conséquent, le ZnO ne doit pas être exposé directement au milieu extérieur. Pour cela, on a recours à l'encapsulation des modules [101] qui permet d'éviter toute dégradation du ZnO ainsi que celle des autres couches des cellules solaires. Toutefois, l'AZO reste le candidat le plus prometteur, appelé à remplacer l'ITO dans la perspective où les réserves d'indium viendraient à s'épuiser [103].

Les TCO que nous venons de décrire sont tous de type n. Il existe également des TCO de type p mais leurs performances restent bien inférieures à celles des TCO de type n, notamment au niveau des résistivités [105].

3.3 Techniques de dépôts des couches minces

Pour l'élaboration de couches minces de matériaux, différentes techniques de dépôt par plasma froid de types décharges ont été mises au point [106]. Dans le domaine des cellules solaires en couches minces de silicium, le premier dépôt de a-Si:H a été réalisé dans un réacteur PECVD radio-fréquence [107] qui représente aujourd'hui l'une des techniques de dépôt les plus répandues. Cette technique fait partie des procédés de dépôt chimique en phase vapeur (CVD). En ce qui concerne le dépôt de couches minces de matériaux tels que les conducteurs et les TCO, celui-ci peut être réalisé par la technique de pulvérisation cathodique magnétron qui fait partie des procédés de dépôt physique en phase vapeur (PVD). Ainsi, divers procédés sont choisis en fonction du type de dépôt à réaliser. Ces procédés sont à basse température ($<400^\circ\text{C}$), et donc à faible budget thermique [60], et sont en général des procédés à plasma froid.

Dans cette partie, nous verrons cette notion de plasma froid puis nous décrirons d'une manière simplifiée le principe de fonctionnement de quelques techniques dépôts en rapport avec le domaine des cellules solaires en couches minces de silicium.

3.3.1 Définition d'un plasma froid

Un plasma est un gaz ionisé constitué de particules neutres (atomes et molécules) et de particules chargées (ions et électrons). C'est un milieu conducteur et électriquement neutre à l'échelle macroscopique. Il est caractérisé par son degré d'ionisation, sa densité et la température de ses espèces. On parlera de plasma froid pour désigner un plasma à faible taux d'ionisation et donc constitué en grande partie de particules neutres. Il s'agit d'une décharge luminescente (ou Glow discharge en anglais) créée à partir d'un gaz neutre à faible pression en présence d'un champ électrique. Les électrons bien plus légers que les ions, sont rapidement accélérés par le champ électrique pour atteindre des températures (T_e) élevées devant celles des ions (T_i) et celles particules neutres (T_n) tel que $T_e \gg T_i \geq T_n$. En raison de la différence de température entre les différentes espèces, le plasma froid est un plasma hors équilibre thermodynamique. Mais comme la masse des électrons est très faible, leur température n'affecte pas celle du plasma qui reste proche de la température ambiante [106, 108]. Les plasmas hors équilibre thermodynamique sont utilisés dans les applications où les basses températures sont requises, telles que l'élaboration de couches minces et les gravures [108]. Dans le domaine des cellules solaires en couches minces, le plasma froid permet l'utilisation de tout type de substrat (verre, métal, plastique) sans risque d'altération [9].

3.3.2 Le procédé de dépôt PECVD

La PECVD est une technique très répandue en industrie. Dans le domaine photovoltaïque, elle est employée par de nombreuses sociétés comme Unisolar Co (aux USA), Kaneka Co (au Japon), T-Solar (en Espagne) et Moser Baer Solar (en Inde) pour le dépôt de couches minces de a-Si:H et de μ c-Si:H. Ce procédé a l'avantage d'être très flexible, il permet de réaliser des dépôts sur de grandes surfaces et de travailler à basse température [109].

3.3.2.1 Principe du procédé PECVD

Un substrat est d'abord introduit dans l'enceinte du réacteur PECVD, où il est fixé à une électrode et porté à une température entre 150 °C et 350 °C. Puis, un mélange de gaz précurseurs à base de SiH_4 est envoyé dans la chambre de dépôt où règne un vide poussé ($< 10^{-6}$ mbar). Le flux et la pression des gaz peuvent être ajustés et contrôlés. En appliquant un champ électrique, une énergie est communiquée au mélange gazeux pour amorcer un plasma. Ce dernier permet la dissociation des molécules de gaz précurseurs en radicaux qui en réagissant à la surface du substrat forment une couche mince de matériau. Il est nécessaire que l'énergie apportée au plasma soit supérieure aux différentes pertes pouvant avoir lieu dans le réacteur afin qu'il puisse être entretenu. En général, le champ électrique créé au sein du réacteur est obtenu en appliquant une tension alternative radio-fréquence RF dont la fréquence standard est de 13,56 MHz [38, 108]. Cette tension est fournie par un générateur de puissance relié à une deuxième électrode du réacteur. Pour un couplage maximum de puissance (RF) au plasma, il est nécessaire d'adapter l'impédance du plasma à celle du générateur. Ceci se fait via un adaptateur d'impédance ou un réseau d'accord.

Pour le dépôt de couches intrinsèques de a-Si:H ou de μ c-Si:H, on utilise principalement du SiH_4 dilué dans de l'hydrogène H_2 nécessaire à la passivation des liaisons pendantes. Dans le plasma, il se produit une dissociation des molécules de SiH_4 et de H_2 en différentes espèces chimiques, comme illustré schématiquement à la Figure 3.6. Puis, des réactions secondaires s'enchaînent dans le plasma entre les espèces chimiques créées et les molécules mères de SiH_4 et de H_2 jusqu'à l'aboutissement d'un régime stationnaire [110].

Pour expliquer le mécanisme de croissance du a-Si:H, plusieurs modèles ont été proposés dont le schéma de surface-diffusion illustré à la La Figure 3.7, basé sur des résultats expérimentaux [111]. Il a été montré que les radicaux de SiH_3 constituent l'espèce dominante du plasma responsable de la croissance de la couche de a-Si:H [112].

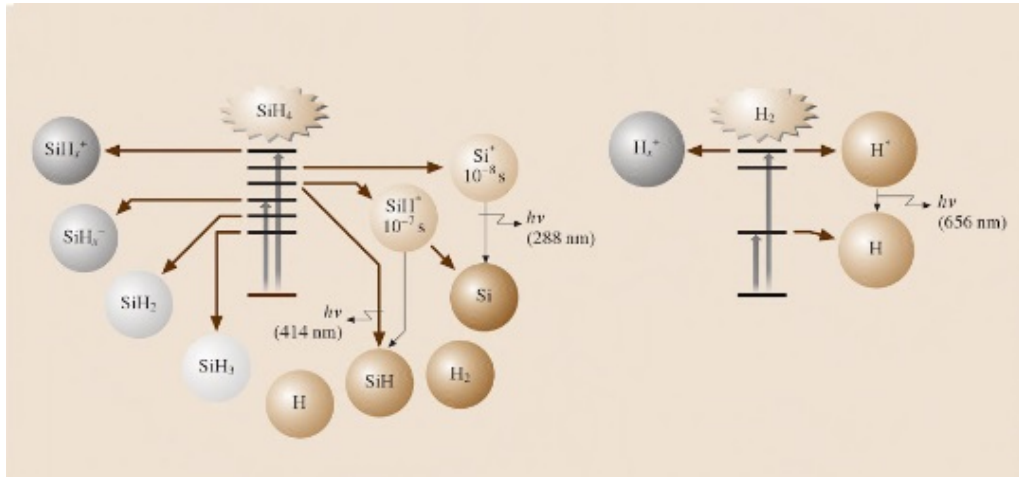


Figure 3.6 – Schéma montrant la dissociation du SiH₄ et du H₂ dans le plasma en différentes espèces chimiques [110].

Le schéma montre les différents mécanismes en surface pouvant avoir lieu lors de la croissance d'une couche de a-Si:H.

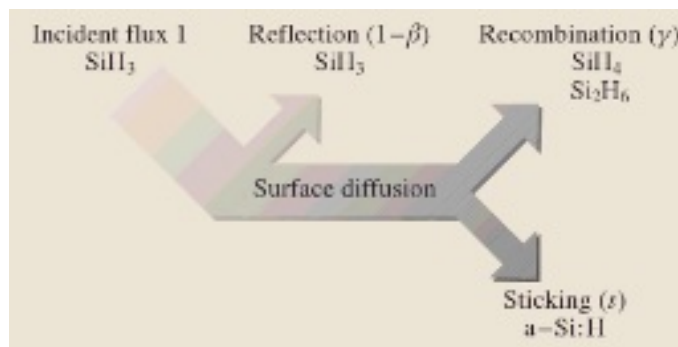


Figure 3.7 – Schéma de surface-diffusion [111].

Le flux de radicaux SiH₃ incident à la surface de dépôt est en partie réfléchi avec une probabilité $1-\beta$. Quant au reste, ils sont adsorbés en surface via les terminaisons d'atomes d'hydrogène et en diffusant, différentes réactions peuvent avoir lieu, comme illustré à la Figure 3.8.

On assiste à :

- l'abstraction d'un atome H de la surface par le SiH₃ conduisant à la formation d'une molécule de SiH₄ et à la création en surface d'une liaison pendante constituant un site de croissance pour les autres radicaux.
- l'interaction entre deux radicaux SiH₃ en surface donnant lieu une molécule de Si₂H₆.
- la diffusion de radicaux SiH₃ vers les sites de croissance pour se fixer à la liaison pendante et former une liaison Si-Si d'où la croissance de la couche de a-Si:H.

Les deux premières réactions ont lieu avec une probabilité dite recombinaison γ . Quant à la dernière, elle possède une probabilité dite de sticking (ou de collage) s .

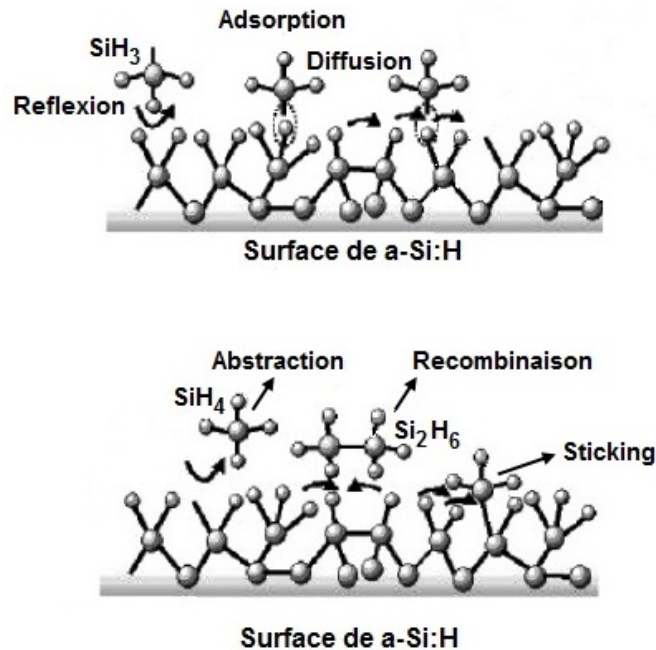


Figure 3.8 – Différentes réactions du radical SiH_3 en surface de la couche de a-Si:H en croissance (d'après [110]).

Par ailleurs, le dopage de type n par le phosphore et le dopage de type p par le bore s'obtiennent en introduisant de la phosphine (PH_3) et du diborane (B_2H_6), respectivement dans la chambre de dépôt. Le dopage type p peut se faire également avec du triméthylbore (TMB, $\text{B}(\text{CH}_3)_3$) [113]. L'incorporation du carbone dans les couches p en vue de l'élaboration des couches fenêtres est obtenue par l'adjonction du gaz méthane (CH_4) au plasma [60].

D'un point de vue industriel, l'inconvénient avec la technique PECVD réside dans la faible vitesse de dépôt comprise entre 1 et $2 \text{ \AA} \cdot \text{s}^{-1}$. Afin d'augmenter les vitesses de dépôts tout en gardant un matériau de bonne qualité, différentes solutions ont été apportées [114]. En augmentant la pression et la puissance du plasma, le dépôt des couches minces peut être réalisé à une vitesse de dépôt de $12 \text{ \AA} \cdot \text{s}^{-1}$ [115]. Une autre solution proposée par l'Institut de MicroTechnologie (IMT) de l'Université de Neuchâtel [116] consiste à augmenter la fréquence du plasma jusqu'à 300 MHz . Il s'agit du procédé VHF GD PECVD (Very High Frequency Glow Discharge PECVD) permettant d'obtenir une vitesse de dépôt de $10 \text{ \AA} \cdot \text{s}^{-1}$. Ce procédé sera détaillé dans la section 3.3.2.2. Une autre méthode basée sur la dissociation du SiH_4 par un filament chauffé entre $1600 \text{ }^\circ\text{C}$ et $2000 \text{ }^\circ\text{C}$, appelée Hot Wire CVD (HWCVD) ou encore catalytique CVD (CAT-CVD) permet d'atteindre des vitesses de dépôt de l'ordre de $30 \text{ \AA} \cdot \text{s}^{-1}$ [114, 117].

3.3.2.2 Système de dépôt VHF-GD-PECVD

La technique de dépôt chimique assistée d'un plasma haute fréquence ou VHF-GD-PECVD (Very High Frequency - Glow Discharge - Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition), appelée encore dépôt par décharge capacitive, a été mise en oeuvre par l'équipe de l'IMT de l'Université de Neuchâtel [116]. Le système de dépôt VHF-PECVD est représenté schématiquement à la Figure 3.9.

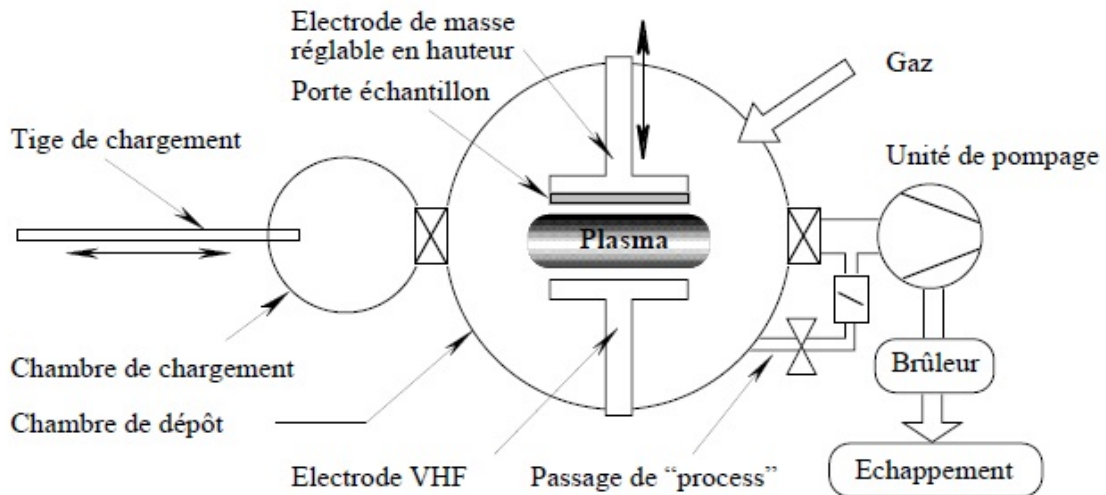


Figure 3.9 – Schéma du système de dépôt par VHF-GD-PECVD [62].

Il est composé d'une chambre unique de dépôt et une chambre de chargement-déchargement (load lock). Le substrat, fixé sur un porte-substrat, est introduit préalablement dans la chambre de chargement où une pression de 10^{-5} mbar peut être obtenue grâce à un pompage. Le porte-substrat est ensuite transféré dans la chambre de dépôt à l'aide d'une tige de chargement pour être fixé à l'électrode de masse réglable en hauteur. Une seconde électrode est alimentée par un générateur VHF réglé à une fréquence de 70 MHz. Un adaptateur d'impédance permet d'optimiser la puissance injectée dans le plasma (minimisation de la puissance réfléchie). La proportion de chaque gaz est contrôlée à l'aide de régulateurs de flux (un par type de gaz) et leur pression est régulée par une vanne papillon située sur le passage de « process ». Les gaz généralement utilisés dans le système de dépôt VHF-PECVD sont résumés dans le Tableau 3.1. Le plasma est initié par une décharge électrostatique obtenue à l'aide d'un dispositif piézo-électrique. Idéalement, le plasma est confiné entre les deux électrodes [62].

Noms	Symboles	Dilutions	Applications
Silane	SiH ₄		Dépôts de silicium
Hydrogène	H ₂		Dilution-Traitements d'interfaces
Phosphine	PH ₃	PH ₃ /H ₂ (1000 ppm)	Dopage type n
Diborane	B ₂ H ₆	B ₂ H ₆ /H ₂ (500 ppm)	Dopage type p
Méthane	CH ₄		Apport de carbone pour les couches carbonées
Dioxyde de carbone	CO ₂		Traitements d'interfaces
Argon	Ar		Nettoyage et purges

Tableau 3.1 – Gaz utilisés dans le système de dépôt par PECVD-VHF [62].

3.3.3 La pulvérisation magnétron radiofréquence

La pulvérisation magnétron radiofréquence est l'une des techniques employées pour la synthèse des TCO comme l'AZO [103]. Cette technique de dépôt constitue une évolution de la pulvérisation cathodique classique ou encore appelée pulvérisation diode. Cette dernière est l'un des procédés plasmas initialement développé pour le dépôt de couches minces de matériaux conducteurs.

La pulvérisation (ou sputtering en anglais) est un procédé qui consiste à déposer une couche mince de matériau à partir d'atomes éjectés de la surface d'un solide (ou cible) suite à un bombardement par des particules énergétiques. Le mécanisme de pulvérisation est un processus purement mécanique de transfert de quantité de mouvement de particules incidentes aux atomes de la cible qui constitue le matériau à déposer [118].

Un gaz plasmagène à très faible pression, en général de l'argon, est injecté au sein d'une enceinte constituée de deux électrodes : une cible portée à un potentiel négatif (cathode) et un porte-substrat relié à la masse (anode). Il se crée un champ électrique qui va initier un plasma froid composé d'atomes d'Argon (Ar), d'ions Ar⁺ et d'électrons. Les ions Ar⁺ sont attirés et accélérés pour venir bombarder la cible, et par transfert de quantité de mouvement, pulvérisent les atomes de la surface de la cible. Ces derniers forment une vapeur qui se diffuse dans toute l'enceinte et dont une partie se condense à la surface du substrat pour former la couche mince du matériau à déposer. Le bombardement ionique de la cible provoque également l'émission d'électrons secondaires. Ces derniers sont accélérés et acquièrent suffisamment d'énergie pour ioniser les atomes du gaz, contribuant ainsi au maintien de la décharge. Le procédé que nous venons de décrire représente la pulvérisation en continu (DC), un procédé qui s'applique essentiellement aux matériaux conducteurs mais non adapté aux matériaux isolants tels que les oxydes. Ces derniers sont souvent pulvérisés en mode radiofréquence (RF) ou en DC pulsé. Ce procédé est appelé pulvérisation cathodique radiofréquence utilisée aussi bien pour les matériaux isolants que pour les matériaux conducteurs [106].

Cependant, l'inconvénient avec le procédé diode est son un faible rendement de pulvérisation. Par conséquent, il a été développé un procédé alternatif appelé pulvérisation magnétron. Dans ce procédé, le bombardement est rendu plus efficace en contrôlant la répartition du plasma à la surface de la cible grâce à système appelé magnétron composé d'une série d'aimants disposés sous la cible. L'action combinée du champ magnétique des aimants et du champ électrique qui règne dans l'enceinte permet de donner une trajectoire hélicoïdale aux électrons se trouvant à proximité de la cible. Cette trajectoire permet en fait d'augmenter le libre parcours moyen effectif des électrons secondaires dans le plasma aux abords de la cible, ce qui favorise l'augmentation du nombre de collisions rendant le plasma beaucoup plus dense dans cette zone. Par conséquent, le bombardement ionique s'intensifie et il en résulte un meilleur rendement de pulvérisation [108].

3.4 Conclusion

Les cellules solaires à base de a-Si:H et μ c-Si:H font partie des technologies couches en silicium. Leur architecture repose sur deux configurations :

- superstrat ou structure p-i-n : qui consiste à déposer successivement les couches p, i et n sur un substrat en verre (ou transparent). Ce dernier recouvert d'une couche de TCO constitue le contact avant de la cellule.
- substrat ou structure n-i-p : qui consiste à déposer successivement les couches n,i et p sur un substrat opaque tel que l'acier inoxydable, l'aluminium ou les films transparents. Celui-ci constitue le contact arrière de la cellule.

La lumière pénètre dans la cellule solaire p-i-n ou n-i-p toujours par sa face avant du côté de la couche p, en raison de la mobilité des trous qui est plus faible que celle des électrons. L'épaisseur des couches dopées des cellules solaires doivent être la plus faible possible afin de minimiser les pertes optiques. Elles servent essentiellement à établir le champ électrique à travers la couche intrinsèque (ou couche active) où a lieu principalement la photogénération des paires électron-trou. Sous l'action du champ électrique, les porteurs électrons et trous sont séparés puis entraînés jusqu'aux couches n et p, respectivement, où ils seront collectés par les électrodes de la cellule.

Les électrodes des cellules solaires en a-Si:H et μ c-Si:H sont à base de matériaux TCO. Ces derniers allient deux propriétés antagonistes à savoir une bonne transparence et une conductivité satisfaisante. Il s'agit de matériaux semiconducteurs dégénérés, généralement de type n, caractérisés par un gap élevé de l'ordre de 3 à 4 eV.

Une troisième propriété est en plus recherchée dans un matériau TCO qui est sa faculté à diffuser la lumière. Cette propriété est rencontrée dans les matériaux TCO rugueux à partir desquels les cellules solaires texturées peuvent être réalisées. La texturation des cellules solaires permet d'augmenter la probabilité d'absorption de la lumière dans celles-ci et du coup d'améliorer les rendements de conversion.

Les matériaux TCO à partir desquels sont basés les électrodes transparentes des cellules solaires en couches minces de silicium peuvent être l'oxyde d'étain (SnO_2), l'oxyde d'indium dopé à l'étain (ou ITO) et l'oxyde de zinc (ZnO). Ces différents TCO ont chacun leurs avantages et leurs inconvénients. Toutefois, c'est l'oxyde de zinc dopé à l'aluminium (ou AZO) qui constitue l'un des candidats les plus prometteurs en matière de TCO pour les cellules solaires en couches minces de silicium. Il présente en effet des propriétés optoélectroniques intéressantes, il est non toxique et ses composants sont présents en abondance dans la croûte terrestre. D'autant plus qu'il est tout à fait compatible avec les procédés de dépôt des cellules solaires à base de a-Si:H et de $\mu\text{c-Si:H}$.

Parmi les procédés de dépôts de couches minces à base de a-Si:H et de $\mu\text{c-Si:H}$, on peut citer la PECVD, la VHF-PECVD et la HWCVD. Il s'agit de techniques de dépôts qui consistent en la dissociation du gaz silane SiH_4 dilué dans l'hydrogène H_2 en différents radicaux. Dans le procédé PECVD ou VHF-PECVD, ce sont notamment les radicaux SiH_3 qui contribuent à la croissance des couches en interagissant à la surface du substrat. L'adjonction des gaz de phosphine (PH_3) et de diborane (B_2H_6) au mélange gazeux à base de SiH_4 et de H_2 permet l'obtention des couches dopées n et p, respectivement. L'obtention de couches fenêtres se fait en injectant par exemple du gaz méthane (CH_4).

La synthèse des matériaux conducteurs et TCO peut être obtenue à l'aide de la technique de pulvérisation magnétron radiofréquence. Il s'agit d'une technique PVD assistée par plasma. Ce dernier est composé d'atomes d'Argon Ar, d'ions Ar^+ et d'électrons. Les ions Ar^+ accélérés par un champ électrique viennent bombarder une cible provoquant la pulvérisation d'atomes. Ces derniers se condensent sur un substrat et il en résulte la formation d'une couche mince de matériau.

Ces différents procédés de dépôts opèrent à basse température ($<400^\circ\text{C}$) et sont donc à faible budget thermique. Le dépôt des couches de matériaux peut être réalisé sur de grandes surfaces et sur tout type de substrat (verre, métal, plastique) sans risque de dégradation.

Dans le chapitre suivant, nous nous proposons de simuler et optimiser les cellules solaires à simple jonction et à multijonction à configuration superstrat.

Simulation et optimisation des cellules solaires en technologie couches minces de silicium

4.1 Introduction

Le silicium amorphe hydrogéné est le matériau de base des cellules solaires en technologie couches minces de silicium. Celles-ci font l'objet d'une intense activité de recherche depuis plusieurs années en vue d'améliorer leurs performances photovoltaïques et de les rendre beaucoup plus stables vis à vis de l'effet SWE. Dans ce domaine de recherche, on distingue essentiellement deux approches [119] :

- L'approche I_{cc} : il s'agit de mettre au point des techniques de piègeage efficaces de la lumière pour augmenter le courant de court-circuit I_{cc} de la cellule solaire.
- L'approche V_{co} : des solutions sont à développer pour améliorer la tension de circuit ouvert V_{co} de la cellule solaire.

L'objectif de ce chapitre est l'optimisation des paramètres photovoltaïques des cellules solaires en vue de l'obtention d'un rendement de conversion élevé et cela selon l'approche V_{co} . Les cellules solaires qui feront l'objet de cette étude reposent sur la configuration superstrat.

Au préalable, nous aborderons quelques concepts en rapport avec la modélisation numérique et nous ferons une description des logiciels de simulation utilisés pour l'optimisation des cellules solaires en couches minces de silicium. Puis, nous commencerons par simuler et optimiser les performances des cellules solaires à simple jonction à base de a-Si:H et μ c-Si:H. Nous expliquerons ensuite ce qu'est le concept

de multijonction. Nous nous proposons alors de simuler et d'optimiser des structures à multijonction comme la structure tandem micromorphe et la cellule triple-jonction. Nous montrerons que ces structures affichent des rendements plus élevés comparés aux cellules à simple jonction, suite à une amélioration de leur tension V_{co} grâce à une meilleure exploitation du spectre solaire.

4.2 La modélisation numérique

Pour l'optimisation des cellules solaires, on a généralement recours à la simulation numérique. La modélisation des dispositifs photovoltaïques est un outil indispensable à l'étude visant à l'amélioration des rendements des cellules solaires. Cette modélisation permet de voir l'influence des différents paramètres physiques sur les performances photovoltaïques, de concevoir et optimiser différents types de cellules, d'évaluer le potentiel d'une structure et son rendement théorique maximum. Plusieurs logiciels de modélisation des dispositifs photovoltaïques sont actuellement disponibles, libres d'accès ou sous licence. Le laboratoire de Microélectronique appliquée de l'Université de Djillali Liabès de Sidi Bel Abbes travaille avec les logiciels d'accès libre tels que PC-1D, AMPS-1D, AFORS-HET-1D et le logiciel sous licence SILVACO-TCAD-2D.

Concernant nos travaux de simulation, notre choix s'est porté sur le logiciel AMPS-1D (Analysis of Microelectronic and Photonic structures) à une dimension, particulièrement adapté à la simulation des cellules solaires à base de silicium amorphe et de polycristallin caractérisés par une large densité de défauts dans leur bande interdite. Cependant, lors de la simulation des structures à multijonction, nous avons réalisé que cela exigeait des logiciels de simulation beaucoup plus adaptés et plus rapide en termes de convergence. Donc, nous nous sommes mis à la recherche d'une éventuelle mise à jour de l'AMPS-1D et cela nous a conduit au logiciel wxAMPS2. Il s'agit d'une nouvelle version de l'AMPS-1D développée par l'Université de l'Illinois à Urbana-Champaign (USA) en collaboration avec l'Université de Nankai de Chine. Puis, il aurait fallu aussi que le logiciel de simulation puisse simuler les courbes $J(V)$ et les courbes de rendement quantique correspondantes à chaque cellule de la structure à multijonction. Pour cela, nous avons interrogé l'un des concepteurs du logiciel wxAMPS2 à ce sujet, Docteur Yming Liu, de l'Université de Nankai. Il nous apprend alors que ce type de simulation est possible avec la nouvelle version wxAMPS3 grâce à l'outil « subcells analysis » ou analyse de sous-cellules. Le wxAMPS3 est en fait une version encore sous développement que le Docteur Liu a bien voulu mettre à notre disposition.

La simulation numérique est basée sur la résolution d'un système d'équations de base qui régit le transport de charge dans les semi-conducteurs. Dans ce qui suit, nous décrirons le système d'équations de base et très brièvement la méthode de résolution utilisée dans l'AMPS-1D.

4.2.1 Équations de base de la modélisation

Le fonctionnement des dispositifs à semiconducteurs peut être décrit en général par un système à cinq équations de base communément appelées équations de Shockley, à savoir l'équation de Poisson, les deux équations de courant et les deux équations de continuité. Ce système d'équations peut être ramené à un système de trois équations car les deux équations de courant sont incluses dans les deux équations de continuité [120]. La modélisation numérique est basée sur la résolution des trois équations fondamentales que sont l'équation de Poisson, l'équation de continuité des électrons et celles des trous. Dans notre cas, ces équations doivent être adaptées au matériau du silicium amorphe hydrogéné qui est caractérisé par une large densité de défauts dans la bande interdite.

4.2.1.1 Équation de Poisson

L'équation de poisson lie les variations du potentiel électrostatique aux densités locales de charge à travers l'équation (4.1).

$$\operatorname{div}(\overrightarrow{\epsilon \operatorname{grad}} \psi) = -\rho_v \quad (4.1)$$

où ψ est le potentiel électrostatique, ϵ est la permittivité locale du milieu et ρ_v est la densité volumique de charge.

Le champ électrique dérive du potentiel électrostatique ψ tel que :

$$\vec{E} = -\overrightarrow{\operatorname{grad}} \psi \quad (4.2)$$

4.2.1.2 Équations de continuité

Les équations de continuité sont exprimées à partir des lois de conservation des porteurs libres. Elles décrivent le mode par lequel les densités d'électrons et des trous évoluent en fonction des mécanismes de transport, de génération et de recombinaison.

En régime stationnaire et dans le cas d'une génération optique de paires électron-trou due à l'éclairement par la lumière, l'équation de continuité des électrons et celle des trous sont données respectivement par les expressions (4.3) et (4.4) :

$$-\frac{1}{q} \operatorname{div}(\vec{J}_n) = G_{\text{opt}} - U \quad (4.3)$$

$$-\frac{1}{q} \operatorname{div}(\vec{J}_p) = -G_{\text{opt}} + U \quad (4.4)$$

où q est la valeur absolue de la charge électrique élémentaire, J_n et J_p sont les densités d'électrons et de trous respectivement, U est le taux net de génération-recombinaison selon le modèle Shockley-Read-Hall et G_{opt} est le taux de génération optique.

4.2.1.3 Équations de transport

Le modèle de dérive-diffusion (drift-diffusion en anglais) est le plus couramment utilisé pour décrire le transport de charge dans un semiconducteur. Ainsi, les densités de courant J_n et J_p peuvent être approximées à l'aide de la théorie de transport de Boltzmann par le modèle de dérive-diffusion [120]. En utilisant les quasi-niveaux de Fermi des électrons et des trous (E_{Fn} et E_{Fp}), leurs expressions sont données par [43] :

$$\vec{J}_n = n\mu_n \overrightarrow{\operatorname{grad}}(E_{Fn}) \quad (4.5)$$

$$\vec{J}_p = p\mu_p \overrightarrow{\operatorname{grad}}(E_{Fp}) \quad (4.6)$$

où n et p sont les concentrations des porteurs électrons et trous respectivement, μ_n et μ_p sont les mobilités des électrons et des trous respectivement.

On peut aussi avoir une formulation plus conventionnelle des équations de transport avec le modèle dérive-diffusion [121] :

$$\vec{J}_n = qn\mu_n \vec{E} + qD_n \overrightarrow{\operatorname{grad}} n \quad (4.7)$$

$$\vec{J}_p = qn\mu_p \vec{E} - qD_p \overrightarrow{\operatorname{grad}} p \quad (4.8)$$

où D_n et D_p sont les coefficients d'Einstein (ou coefficient de diffusion) des électrons et des trous.

Avec la statistique de Boltzmann, ces coefficients ont pour expressions :

$$D_n = \frac{kT}{q} \mu_n \quad \text{et} \quad D_p = \frac{kT}{q} \mu_p \quad (4.9)$$

Le premier terme des expressions (4.7) et (4.8) représente le courant de dérive induit par le champ électrique \vec{E} . Le deuxième terme représente le courant de diffusion induit par un gradient de concentration de porteurs.

En introduisant les équations (4.5) et (4.6) dans les équations (4.3) et (4.4), on obtient :

$$\frac{1}{q} \text{div}(\mu_n n \overrightarrow{\text{grad}} E_{Fn}) = U - G_{\text{opt}} \quad (4.10)$$

$$\frac{1}{q} \text{div}(\mu_p p \overrightarrow{\text{grad}} E_{Fp}) = -U + G_{\text{opt}} \quad (4.11)$$

4.2.2 Calcul de la densité volumique de charge

Le terme ρ_v de l'équation de Poisson (4.1) représente la densité volumique de charge du matériau semiconducteur qui s'exprime par l'équation suivante [121] :

$$\rho_v = q(p - n + N_{\text{net}}) \quad (4.12)$$

où :

- n et p sont les concentrations des porteurs libres en électrons et en trous respectivement ;
- N_{net} est la densité totale d'états de pièges ionisés. Dans le silicium amorphe hydrogéné, elle est due soit aux impuretés dopantes ionisées soit aux états pièges chargés. Ces derniers sont essentiellement de trois types : liaisons pendantes, queues de bandes et pièges discrets.

On a ainsi :

$$N_{\text{net}} = \text{dop} + N_t \quad (4.13)$$

avec :

- dop : étant la charge due aux dopants qui se comportent comme des pièges, tel que :

$$\text{dop} = N_D^+ - N_A^- \quad (4.14)$$

où N_D^+ et N_A^- sont les taux d'ionisation pour les états donneurs et accepteurs respectivement.

- N_T est la densité totale d'états de pièges ionisés qui sera exprimée par :

$$N_T = N_{TS} + N_G + N_{SLT} \quad (4.15)$$

où N_{TS} , N_G et N_{SLT} sont les densités de pièges ionisés dues aux queues de bandes, aux liaisons pendantes et aux pièges discrets, respectivement.

On a :

$$N_{TS} = N_{TS_D} - N_{TS_A} \quad (4.16)$$

où N_{TS_D} , N_{TS_A} sont les densités des pièges ionisés dans les queues de bande de valence et de conduction, respectivement.

$$N_G = N_{GD}^+ - N_{GA}^- \quad (4.17)$$

où N_{GD}^+ et N_{GA}^- sont les densités des pièges chargées résultant des liaisons pendantes de type donneur et de type accepteur, respectivement.

$$N_{SLT} = N_{SLT_D}^+ - N_{SLT_A}^- \quad (4.18)$$

où $N_{SLT_D}^+$ et $N_{SLT_A}^-$ sont les densités des états discrets de type donneur et de type accepteur ionisés, respectivement.

L'expression de chaque terme des équations (4.16), (4.17) et (4.18) est donnée à la section 2.3 du chapitre 2.

4.2.3 Résolution numérique du système d'équation de base

La modélisation des phénomènes de transport dans les dispositifs à semiconducteurs passe par la résolution du système à trois équations suivant :

$$\begin{aligned} \text{div}(\overrightarrow{\epsilon \text{grad}} \psi) &= -\rho_v \\ \frac{1}{q} \text{div}(\overrightarrow{\mu_n n \text{grad}} E_{Fn}) &= U - G_{\text{opt}} \\ \frac{1}{q} \text{div}(\overrightarrow{\mu_p p \text{grad}} E_{Fp}) &= -U + G_{\text{opt}} \end{aligned} \quad (4.19)$$

Il s'agit d'un système à trois équations différentielles couplées non linéaires dont la résolution ne peut être envisagée que par une méthode de résolution numérique. Dans l'AMPS-1D, celle-ci est basée sur la méthode des différences finies et l'algorithme de Newton-Raphson.

La résolution consiste à déterminer trois variables d'état, à savoir le potentiel électrostatique ψ , les quasi-niveaux de Fermi des électrons E_{Fn} et des trous E_{Fp} , à partir desquelles les concentrations de porteurs, les champs, les courants, la densité des pièges, les taux de recombinaisons, les diagrammes de bandes et bien d'autres paramètres peuvent ensuite être calculés. Cette résolution nécessite d'imposer des conditions aux limites à la structure [122] :

- en $x=0$ (à l'extrémité gauche de la structure) :

$$\psi(0) = \psi_0 - V_{\text{bias}} \quad (4.20)$$

$$J_n(0) - qS_{n0} [n(0) - n_0(0)] = 0 \quad (4.21)$$

$$J_p(0) + qS_{p0} [p_0(0) - p(0)] = 0 \quad (4.22)$$

- en $x=L$ (à l'extrémité droite de la structure) :

$$\psi(L) = 0 \quad (4.23)$$

$$J_n(L) + qS_{nL} [n_0(L) - n(L)] = 0 \quad (4.24)$$

$$J_p(L) - qS_{pL} [p(L) - p_0(L)] = 0 \quad (4.25)$$

où ψ_0 représente le niveau du vide à l'équilibre thermodynamique en $x=0$, V_{bias} est la tension de polarisation appliquée au dispositif, S_n et S_p sont les vitesses de recombinaisons en surface des électrons et des trous respectivement, n et p sont les concentrations des électrons et des trous respectivement à l'illumination, n_0 et p_0 sont les concentrations des électrons et des trous respectivement à l'obscurité.

4.2.4 Description du logiciel de simulation AMPS-1D

Le logiciel de simulation AMPS-1D (Analysis Microelectronic and Photonic Structure) a été développé en 1997 par le professeur Stephen FONASH et ses collaborateurs de l'Université de l'état de Pennsylvanie (Etats-Unis). Ce logiciel est très populaire au sein de la communauté scientifique, on estime d'ailleurs qu'environ 800 groupes de chercheurs l'utilisent. Il a été conçu pour concevoir, analyser et optimiser les structures destinées aux applications de la microélectronique, du photovoltaïque et de l'opto-électronique. Les matériaux des structures peuvent être à base de silicium cristallin, du silicium amorphe ou polycristallin.

Le noyau de l'AMPS-1D est écrit en langage FORTRAN. Son interface utilisateur GUI (Graphical User Interface) est basée sur la MFC (Microsoft Foundation Classes) et de ce fait l'usage de ce logiciel reste limitée au système d'exploitation Windows.

La Figure 4.1 montre une capture d'écran du logiciel AMPS-1D prise au démarrage. Il offre une interface utilisateur simple représentée à la Figure 4.2 qui comporte une barre de menus et une barre d'icônes. La fenêtre juste en-dessous s'ouvre en cliquant sur « New » ou en important un fichier existant à partir d'un emplacement donné. Cette fenêtre propose différents boutons regroupés essentiellement en 4 zones.

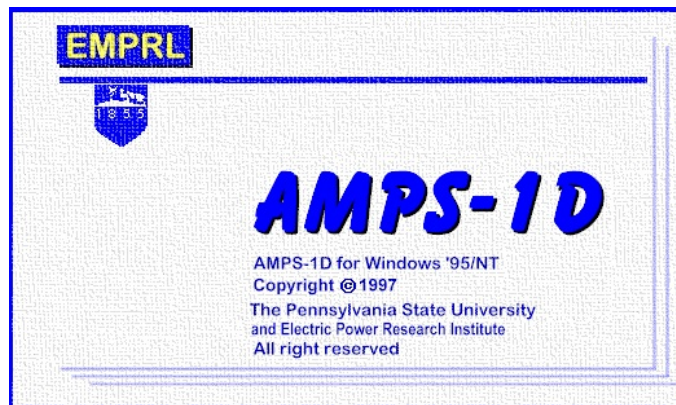


Figure 4.1 – Fenêtre de présentation du logiciel AMPS-1D.

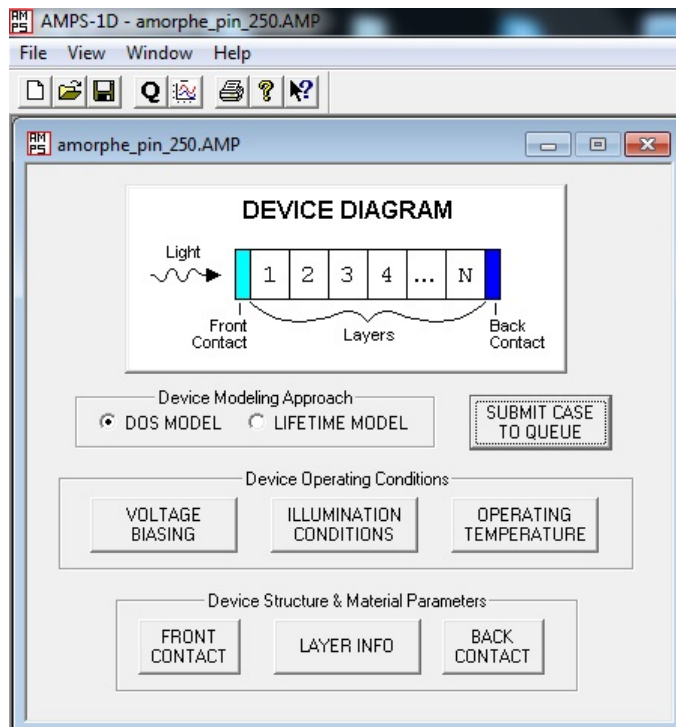


Figure 4.2 – Interface utilisateur du logiciel AMPS-1D.

1. La première zone : comporte les boutons qui permettent de sélectionner le modèle DOS (DOS Model) ou le modèle durée de vie (Lifetime Model).

2. La deuxième zone comporte trois boutons, à savoir :

- le bouton « Voltage Biasing » pour définir les tensions de polarisation de la structure.
- le bouton « Illumination conditions » donne accès à la fenêtre qui permet de configurer la simulation en conditions d'obscurité ou d'illumination avec ou sans réponse spectrale et d'accéder à la boîte de dialogue des paramètres d'absorption et d'illumination, illustrée à la Figure 4.3. Cette dernière permet de configurer les paramètres optiques comme le flux lumineux ainsi que le gap optique et le spectre d'absorption spécifiques à chaque matériau semiconducteur.

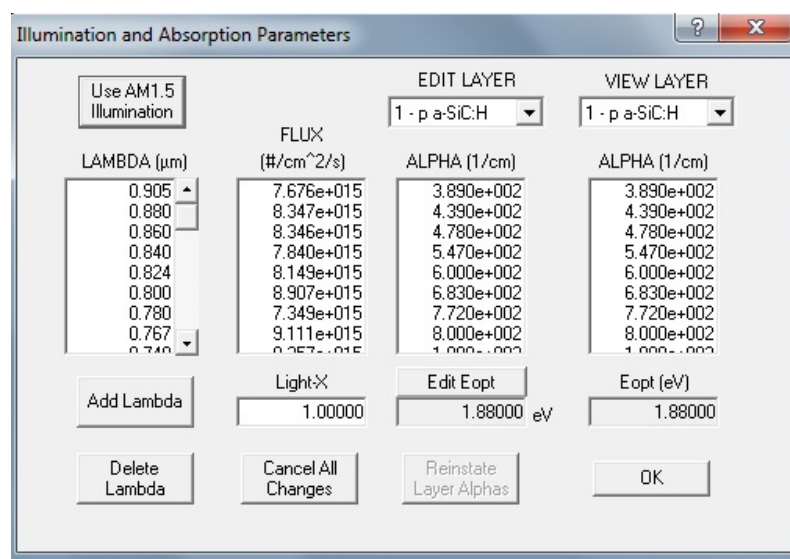


Figure 4.3 – Boîte de dialogue des paramètres d'illumination et d'absorption.

- le bouton « Operating Temperature » permet de spécifier la température de fonctionnement de la structure.

3. La troisième zone comporte trois boutons, à savoir :

- le bouton « Layer Info » donne accès à la boîte de dialogue illustrée à la Figure 4.4 permettant de définir la structure solaire à simuler avec ses différentes couches. Les paramètres électriques généraux de chaque couche de matériau peuvent être définis.

Quant à la distribution d'états dans la bande interdite du a-Si:H, les paramètres spécifiques aux queues de bandes sont définis via la fenêtre du bouton « Edit Band Tails Parameters » illustrée à la Figure 4.5, ceux des liaisons pendantes et des états pièges discrets sont définis via la fenêtre du bouton « Edit Gap State Parameters » illustrée à la Figure 4.6.

Le bouton « Edit Spectral Parameters » permet d'accéder également à la fenêtre de la Figure 4.3 pour la configuration des paramètres optiques.

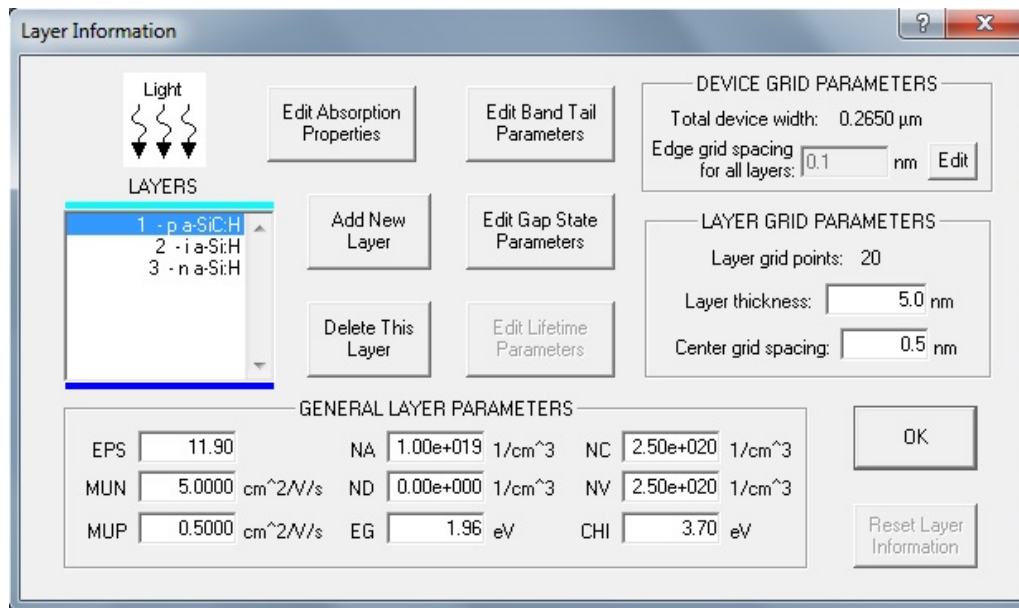


Figure 4.4 – Boîte de dialogue pour définir la structure à simuler et configurer les paramètres de ses différentes couches.

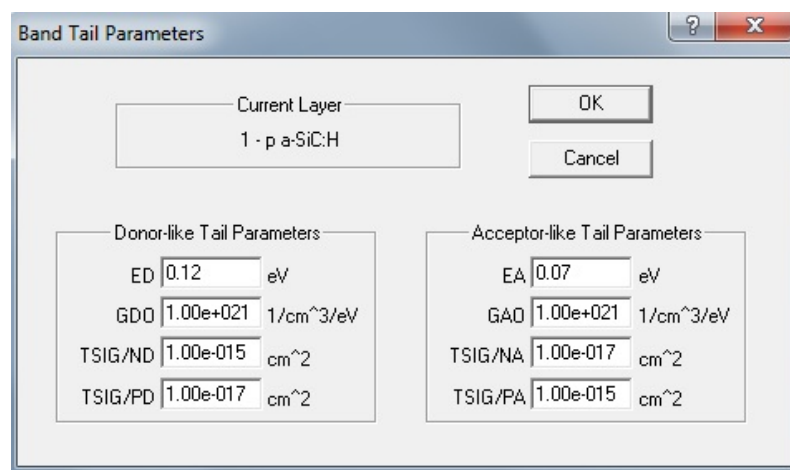


Figure 4.5 – Boîte de dialogue de la configuration des paramètres des queues de bandes.

Dans la fenêtre de la Figure 4.4, l'utilisateur peut régler le maillage de la structure en spécifiant un pas au centre et un pas aux bords pour chaque couche. Notons que le pas aux bords est le même pour toutes les couches de la structure dans l'AMPS-1D.

- deux boutons pour fixer les paramètres des contacts avant et arrière de la structure.
4. La quatrième zone contient un bouton « Submit case to queue » qui permet de lancer la simulation et cela après avoir sauvegardé au préalable le fichier. L'utilisateur doit aussi répondre au message d'avertissement lui proposant de générer ou pas les fichiers de sortie à l'issue de la simulation.

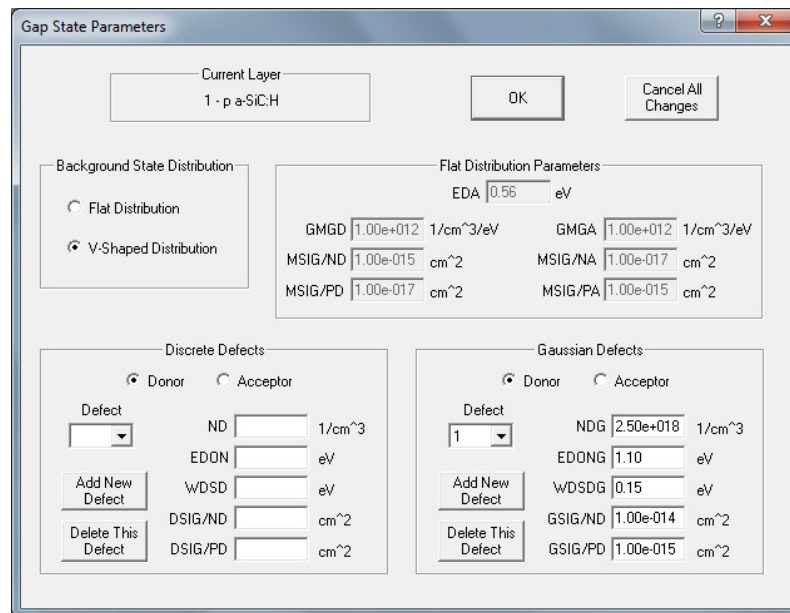


Figure 4.6 – Boîte de dialogue de la configuration des paramètres des liaisons pendants, les défauts midgap et les pièges discrets.

Cela peut être utile par exemple pour l'exportation des résultats vers des logiciels comme Origin en vue de leur exploitation. Toutefois, la visualisation des résultats peut se faire directement à partir de l'interface de l'AMPS-1D. Pour ce faire, on clique sur l'icône « Plotting » pour accéder à la fenêtre « Plot Specification », illustrée à la Figure 4.7, où il est possible de visualiser les résultats comme les paramètres de sortie d'une cellule solaire, les courbes $I(V)$, le rendement quantique, les diagrammes de bandes et les taux de recombinaison. A la fin de la simulation, le bouton « Submit » bascule à la fonction Reset. Il est possible aussi d'interrompre la simulation à tout moment en cliquant sur l'icône de « Q ».

La signification des paramètres électriques et optiques utilisés dans l'AMPS-1D est donnée en annexe A.

4.2.5 Description des logiciels de simulation wxAMPS2

Le code de l'AMPS-1D a été rendu accessible à quelques groupes de chercheurs pour le développement d'un nouveau code qui puisse satisfaire aux exigences en matière de simulation de la communauté photovoltaïque. Le wxAMPS2 constitue l'une des nouvelles versions du logiciel AMPS-1D qui a été développée par l'Université de l'Illinois à Urbana-Champaign en collaboration avec l'Université de Nankai de Chine. Ce logiciel est relativement plus stable et plus performant. Son noyau est écrit en langage C++ et il est implémenté pour différentes plateformes.

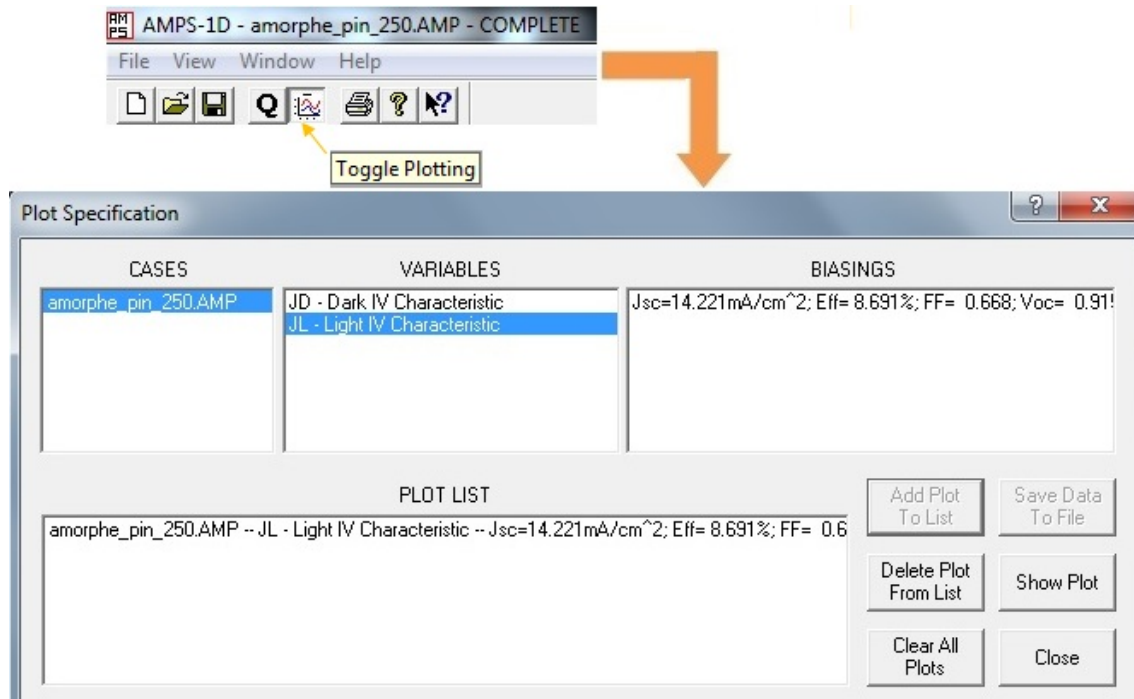


Figure 4.7 – Fenêtre des résultats et du tracé des courbes de sortie.

Une nouvelle interface utilisateur GUI a été développée en utilisant une bibliothèque multiplateforme appelée wxWidgets. Cette interface offre une plus grande souplesse pour l'introduction des données et une meilleure visualisation des résultats rendant leur comparaison et leur analyse plus facile. L'algorithme de base du simulateur a fait l'objet d'un bon nombre de révisions. En conservant les mêmes principes physiques de bases et la même description numérique des défauts et des recombinaisons de l'AMPS-1D, un bout de code a été ajouté permettant de tenir compte de l'effet des courants tunnels [123]. En effet, ce code intègre le modèle de l'effet tunnel assisté par les défauts ou TAT (Trap Assisted Tunneling) [124] et celui de l'effet tunnel intra-bande (Intra Band Tunneling) [125]. Le modèle TAT est requis quand un fort champ électrique est présent au niveau des jonctions comme dans le cas des cellules solaires tandem ou toute autre structure à multijonction. Ce modèle rend la simulation des cellules à multijonction plus précise. Le modèle d'effet tunnel intra-bande fournit des résultats beaucoup plus réalistes concernant la simulation des cellules solaires à hétérojonctions [126]. L'algorithme combine les méthodes de Newton et Gummel pour la résolution des modèles d'effet tunnel en plus du modèle de Dérive-Diffusion utilisé par l'AMPS-1D. Ces méthodes améliorent considérablement la stabilité et la rapidité du code, la convergence en est grandement améliorée, et elles permettent aux deux modèles d'effet tunnel de bien fonctionner ensemble à l'intérieur du simulateur. Par ailleurs, le wxAMPS2 permet de modéliser une cellule solaire avec un nombre illimité de couches et par conséquent il est bien adapté à la simulation des cellules solaires à couches graduelles [127].

Le wxAMPS2 est donc un logiciel multiplateforme conçu pour fonctionner sur différents systèmes d'exploitation. Son interface utilisateur graphique (GUI) intuitive, illustrée à la Figure 4.8, permet de définir et de configurer aisément les structures solaires à plusieurs couches.

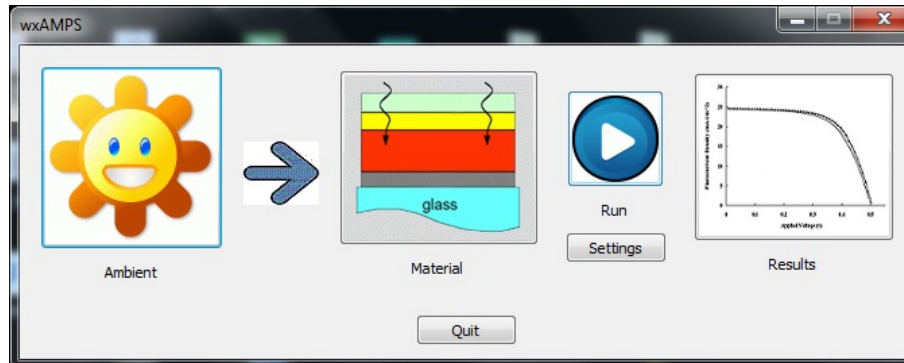


Figure 4.8 – Interface utilisateur du logiciel wxAMPS2.

Cette interface graphique propose trois boîtes de dialogues :

1. Une boîte de dialogue « Ambient », illustrée à la Figure 4.9, qui permet à l'utilisateur :
 - de spécifier la température de fonctionnement du dispositif ;
 - de charger un spectre solaire particulier à partir de fichiers déjà existants ;
 - de configurer le rendement quantique ;
 - de configurer les paramètres des contacts de la cellule solaire ;
 - de simuler le fonctionnement de la cellule solaire à l'obscurité ou sous éclairage à différentes tensions de polarisation en chargeant les fichiers correspondants.
2. Une boîte de dialogue « Material », illustrée à la Figure 4.10, permet de définir les différentes couches de matériau composant la structure solaire à simuler. Les paramètres d'entrée spécifiques à chaque couche peuvent être introduits manuellement, ou bien être chargés à partir de fichiers déjà existants permettant ainsi à l'utilisateur de créer plus rapidement son dispositif.

Comme on peut le voir à droite de la boîte de dialogue, chaque couche de matériau lui est associée 4 onglets.

- L'onglet « Electrical » permet de définir les paramètres électriques de chaque couche tels que le gap, la permittivité, l'affinité électronique, la mobilité des porteurs, etc ;
- L'onglet « Defect » permet de définir la distribution d'états dans la bande interdite d'un matériau donné ;

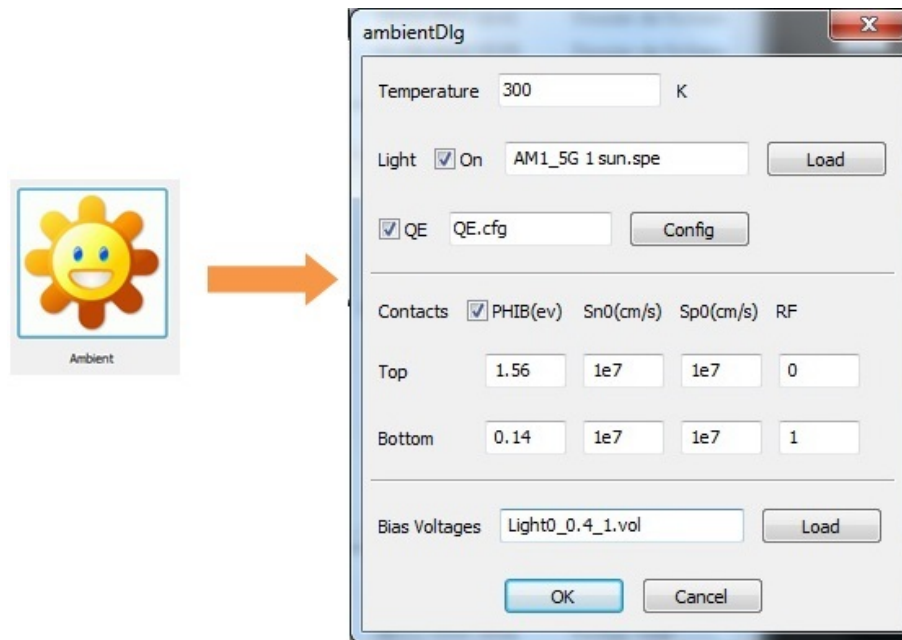


Figure 4.9 – Boîte de dialogue « Ambient » de l'interface de wxAMPS2.

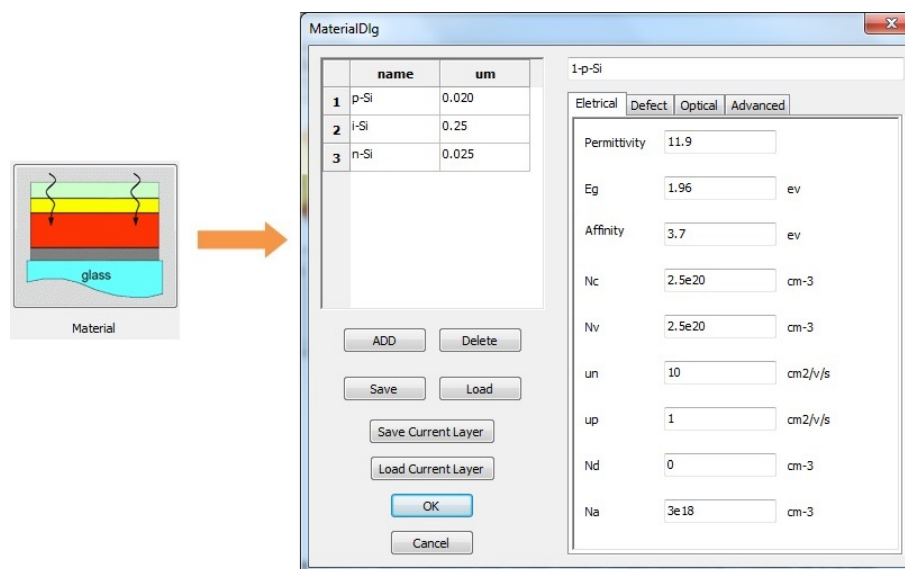


Figure 4.10 – Boîte de dialogue « Material » de l'interface de wxAMPS2.

- L'onglet « optical » permet de charger directement le fichier du coefficient d'absorption spécifique à chaque couche alors que dans la version antérieure (AMPS-1D), il fallait créer manuellement une liste de coefficients d'absorption et cela pour chaque couche de la cellule solaire ;
- L'onglet « advanced » : permet de définir le maillage à appliquer à la structure. Cela consiste à spécifier deux pas de maillage pour chaque couche, un pas aux bords et un pas au centre, de sorte que le maillage augmente exponentiellement entre les deux. Dans ce cas, le pas du centre doit être fixé à une valeur inférieure à la moitié de l'épaisseur de la couche.

3. Un bouton « Settings » donne accès à la boîte de dialogue illustrée à la Figure 4.11, permettant de :
 - sélectionner le modèle d'effet tunnel approprié (TAT ou Intra-band) ;
 - de régler les paramètres numériques qui assurent une bonne convergence du logiciel.

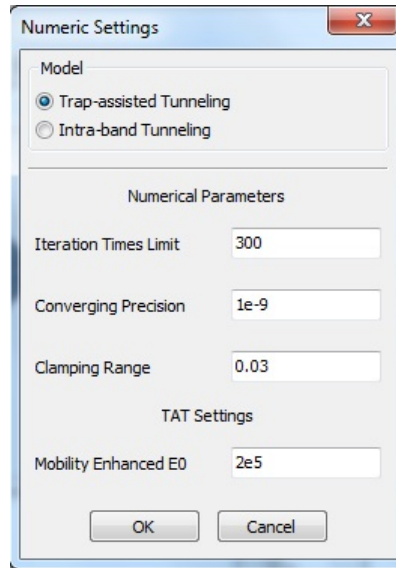


Figure 4.11 – Boîte de dialogue « Numeric Settings » de l'interface de wxAMPS2.

4. Une boîte de dialogue « Results », illustrée à la Figure 4.12 qui permet d'afficher les résultats essentiellement sous formes d'une variété de courbes, à savoir : les caractéristiques I-V avec les paramètres de sortie de la cellule solaire (V_{co} , J_{cc} , FF et E_{ff}) et les résistances R_p et R_s , les diagrammes de bandes, la concentration des porteurs, la distribution du champ électrique interne, la densité de courant, les taux de génération et recombinaison, la durée de vie des porteurs et le rendement quantique. Dans cette version, seule le rendement quantique d'une cellule solaire simple jonction peut être fourni. Quant au calcul du rendement quantique des cellules à multijonction, il est pris en charge par la version wxAMPS3. Les figures de courbes peuvent être copiées ou directement sauvegardées au format .bmp. Les résultats peuvent être extraits des courbes pour pouvoir être exploités par des logiciels comme Origin ou bien être exportés ou importés dans des fichiers .csv.
5. Le bouton « Run » permet de lancer la simulation.

4.2.6 Description du logiciel de simulation wxAMPS3

Le logiciel de simulation wxAMPS3 représente la nouvelle version du logiciel wxAMPS2 qui est en cours de développement. Il devrait incorporer trois modèles

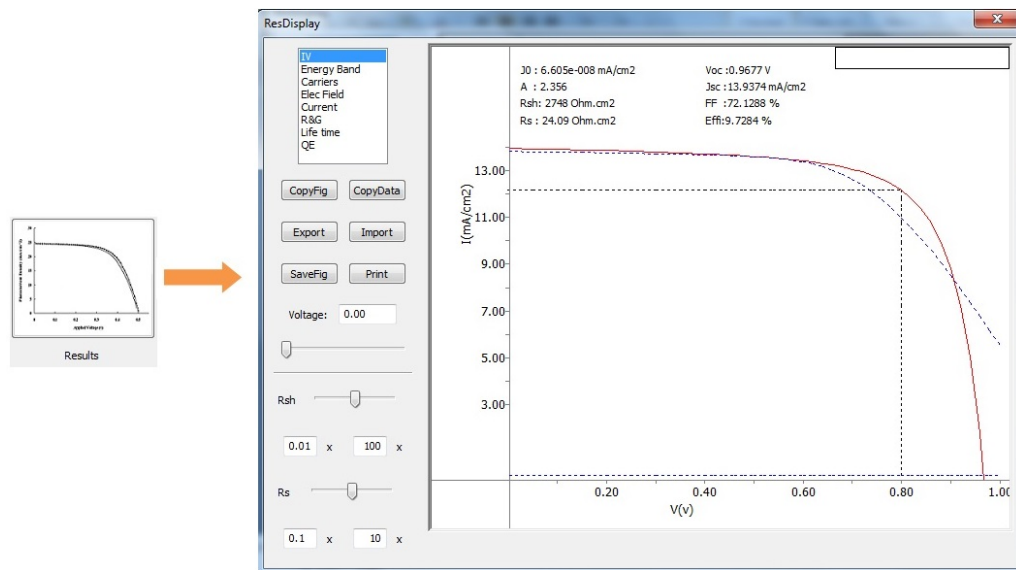


Figure 4.12 – Boîte de dialogue « Results » de l'interface de wxAMPS2.

d'effet tunnel à savoir le modèle TAT, le modèle intra-band Tunneling et le modèle Band-To-Band Tunneling (ou effet tunnel bande à bande). La version que nous disposons n'intègre que le modèle Band to Band Tunneling. Celle-ci nous permettra d'effectuer ce qu'on appelle une analyse de sous-cellules qui s'avère un outil très utile pour l'étude d'une structure solaire à multijonction. A partir du profil d'absorption de cette dernière sont générées les courbes $J(V)$ correspondant à chaque cellule de la multijonction et une courbe pseudo $J(V)$ pour l'ensemble de la structure. Toutes ces courbes sont utiles notamment pour le contrôle du current matching dont nous parlerons dans nos travaux de simulation. Outre les courbes $J(V)$, on a également accès aux courbes de rendement quantique des sous-cellules permettant de révéler la partie du spectre d'absorption absorbée par chacune de celles-ci.

La Figure 4.13 illustre l'environnement de travail du wxAMPS3. Etant donné qu'il s'agit d'une version incomplète, on remarquera que certains paramètres sont inactifs (en grisé).

On peut distinguer essentiellement quatre parties dans l'interface utilisateur, à savoir :

1. La partie « Solar Cell Definition » délimitée par le cadre rouge permet de définir la structure de la cellule solaire à simuler. Elle reprend la fenêtre « Material » de l'interface du wxAMPS2 (cf. Figure 4.10) sauf que l'onglet « Advanced » intègre plus paramètres.
2. La partie « Environment » délimitée par le cadre vert reprend tous les paramètres de la fenêtre « Ambient » de wxAMPS2 en intégrant en plus deux cases à cocher, à savoir :

- La case « Stop at V_{oc} » : qui permet d'arrêter la simulation à la tension V_{co} .
 - La case « Sub-cells analysis » : qui permet de configurer l'analyse sous-cellules des structures solaires à multijonction.
3. La partie délimitée par le cadre orange reprend les paramètres de la fenêtre « Numeric Settings » du wxAMPS2 (cf. Figure 4.11). Dans la zone « Models », le troisième modèle d'effet tunnel « band to band tunneling » a été ajouté aux deux modèles TAT et « Inter-Band Tunneling » en grisé. On trouve aussi une zone « Physics » comportant un paramètre « Transfert Matrix Method (Optical) » et un paramètre en grisé « Photon recycling ».
 4. La partie « Simulation Output » délimitée par le cadre violet dans laquelle on retrouve les éléments de la fenêtre « Results » du wxAMPS2 (cf. Figure 4.12) pour la visualisation des résultats de simulation. En bas à gauche se trouve une fenêtre qui affiche les informations liées au déroulement de la simulation. A droite, on a accès au bouton Apply qui permet d'appliquer les changements effectués dans le paramétrage, et au bouton Run qui permet de lancer la simulation. Quant aux autres boutons, ils sont inactifs.

Les étapes à suivre pour configurer l'analyse de sous-cellules dans le wxAMPS3 sont les suivantes :

- Charger ou créer une structure solaire à multijonction ;
- Cocher la case « band-to-band tunneling » ;
- Décocher la case « Transfert Matrix Method » ;
- Cocher la case « sub-cell analysis » ;
- Cocher la case « light on » pour générer les courbes $J(V)$ des sous-cellules ainsi que la pseudo-courbe $J(V)$ de la structure ;
- Cocher la case « QE » et charger le fichier « PhotonBiasQE.cfg » à partir du dossier du wxAMPS3 pour générer les courbes de rendement quantique des sous-cellules.

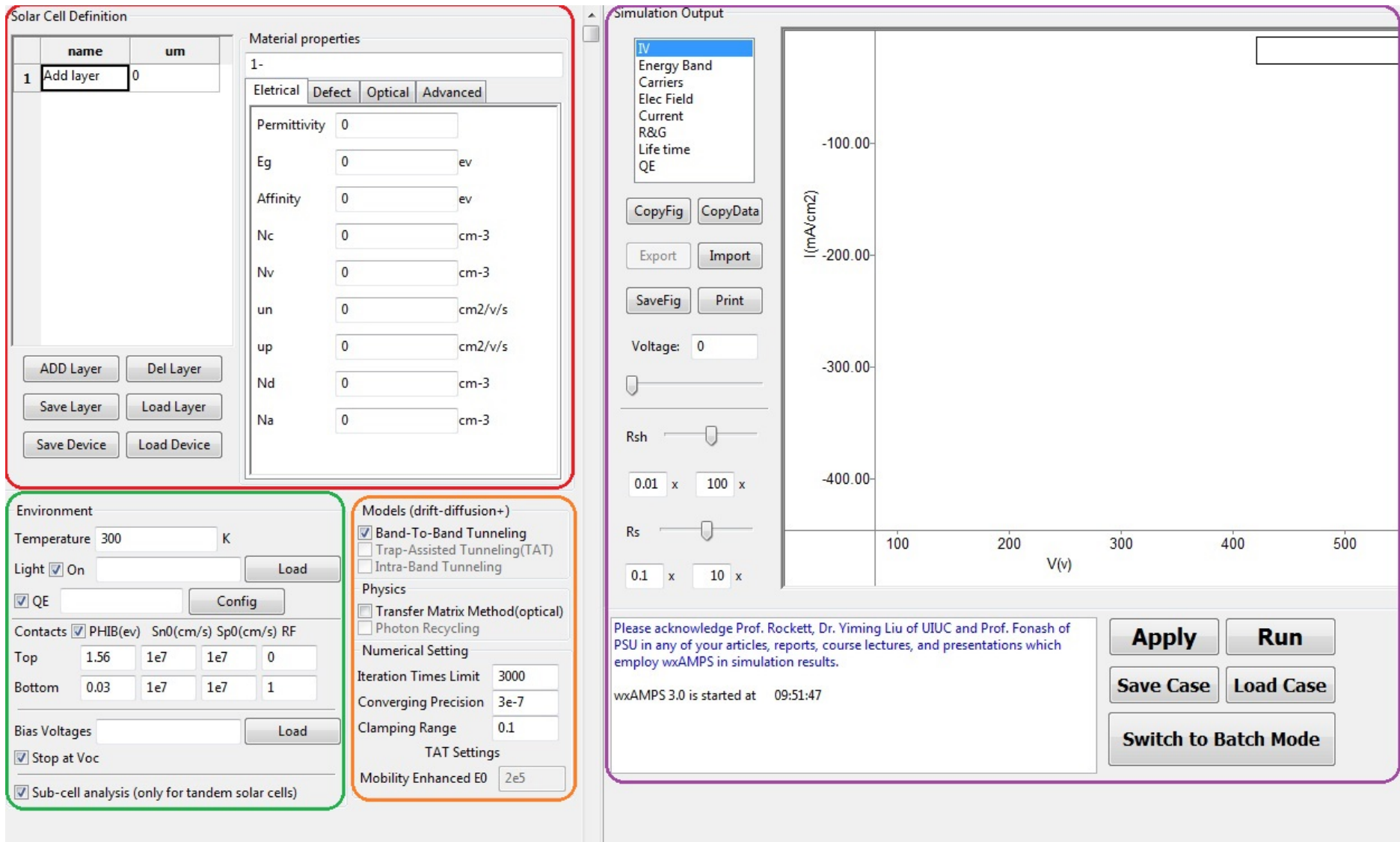


Figure 4.13 – Illustration de l’environnement de travail du logiciel wxAMPS3.

4.3 Simulation et optimisation d'une cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H

Dans cette partie, nous avons pour objectif de simuler et d'optimiser une structure solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H afin d'obtenir de bonnes performances photovoltaïques. L'optimisation d'une cellule solaire doit porter sur ses différentes couches y compris ses interfaces telles que l'interface p-i et l'interface TCO-p. Comme nous l'avons déjà mentionné dans le chapitre 3, les couches p et n doivent posséder un niveau de dopage assez élevé afin de minimiser les pertes électriques dans la cellule solaire. Leur épaisseur doit être aussi mince que possible afin de limiter les pertes optiques et par conséquent permettre à l'absorption des photons d'avoir lieu principalement dans la couche active. Le rôle essentiel des couches dopées est d'établir le champ électrique à travers celle-ci. La couche p doit être en plus une couche fenêtre laquelle favorise la transmission du rayonnement solaire vers la couche active, ce qui se traduit par une amélioration de la tension V_{co} et du rendement de conversion E_{ff} [128]. Cependant la tension V_{co} est très sensible à l'interface p-i où sont localisés une grande densité de défauts constituant des centres de recombinaison [129] et il est donc nécessaire d'optimiser cette interface [9]. La tension V_{co} dépend également du gap de mobilité et des propriétés volumiques de la couche active [130]. L'épaisseur de cette dernière est un paramètre clé qu'il est essentiel d'optimiser afin d'obtenir les meilleures performances. L'optimisation de l'interface TCO-p est aussi à prendre en compte puisque celle-ci peut affecter le facteur de forme et donc le rendement de conversion [99] de la cellule solaire. Nous précisons toutefois que dans cette étude, la simulation des cellules solaires s'effectuera sans les couches TCO puisque celles-ci ne sont pas prises en charge par l'AMPS-1D et ni par le wxAMPS2.

Dans ce qui suit, la simulation et l'optimisation de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H se feront à l'aide l'AMPS-1D. Nous chercherons à optimiser le gap de mobilité de la couche active, l'interface p-i et l'épaisseur de la couche active afin d'obtenir de bonnes performances photovoltaïques. Pour les besoins d'analyse, nous avons souvent recours au taux de recombinaison en condition de circuit ouvert (à $V=V_{co}$). Il s'agit d'un outil qui se révèle très utile pour analyser l'influence des différentes parties de la cellule solaire sur la tension V_{co} [119].

4.3.1 Optimisation du gap de mobilité de la couche active de la cellule solaire p-i-n à base de a-Si:H

La Figure 4.14 illustre la structure schématique de la cellule solaire p-i-n à base de a-Si:H. La couche p est une couche fenêtre à base de a-SiC:H dont la valeur du gap est de 1,96 eV. Les couches dopées p et n prennent respectivement les valeurs d'épaisseur de 5 nm et 10 nm. L'épaisseur de la couche active est fixée à une valeur de 250 nm.

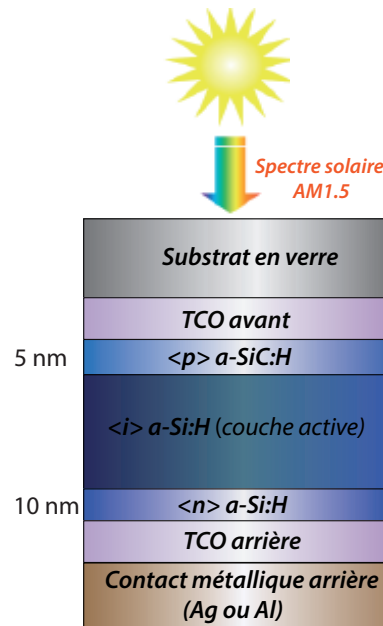


Figure 4.14 – Structure schématique de la cellule p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H simulée en conditions d'illumination AM1.5G à l'aide de l'AMPS-1D.

Nous allons simuler la cellule p-i-n en conditions d'illumination AM1.5G à l'aide de l'AMPS-1D, en faisant varier le gap de mobilité de la couche active afin d'observer son effet sur les performances photovoltaïques.

Le Tableau 4.1 résume les paramètres de sortie de la cellule p-i-n pour trois valeurs de gap : 1,7 eV, 1,75 eV et 1,82 eV. Les différents paramètres injectés dans l'AMPS-1D sont extraits pour la plupart de la bibliothèque et du site du logiciel AMPS-1D. Ils sont donnés en annexe A (Tableau A.2 et Tableau A.3).

E_g (eV)	V_{co} (V)	J_{cc} (mA/cm ²)	FF (%)	E_{ff} (%)
1,7	0.807	14,342	68,4	7,91
1,75	0,852	14,295	67,9	8,272
1.82	0.916	14,234	67	8,74

Tableau 4.1 – Paramètres de sortie de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H pour différentes valeurs de gap de mobilité de la couche active.

Les résultats montrent que la tension V_{co} augmente avec l'accroissement du gap et cela d'une manière proportionnelle, ce qui est en accord avec la littérature [130]. Il en résulte de meilleurs rendements de conversion. Le gap de mobilité de la couche active dont la valeur est de 1,82 eV correspond à la tension V_{co} la plus élevée et au meilleur rendement de conversion E_{ff} .

La Figure 4.15 donne les taux de recombinaison en conditions de circuit ouvert (à $V=V_{co}$) pour les différentes valeurs de gap. On voit que l'accroissement du gap de mobilité se traduit par une baisse du taux de recombinaison dans la couche active, ce qui explique l'augmentation de la tension V_{co} [119].

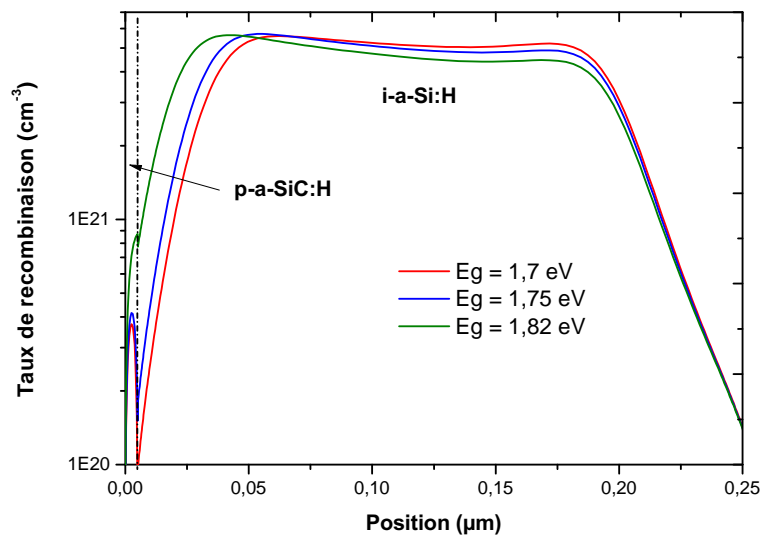


Figure 4.15 – Taux de recombinaison en conditions de circuit ouvert ($V=V_{co}$) à différentes valeurs de gap de la couche active E_g de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H simulée en condition d'illumination AM1.5G avec l'AMPS-1D.

En revanche, on constate qu'à l'interface p-i et sur les premiers 50 nm de la couche active, le taux de recombinaison est plus important pour une valeur de gap plus grande. Cela peut expliquer la diminution du facteur de forme FF avec le gap. Les pertes par recombinaison affectent aussi bien la tension V_{co} que le facteur de forme FF.

Sur la Figure 4.16a, on constate que plus le gap est grand, plus le profil du champ électrique interne est meilleur. Il en résulte une meilleure collecte des porteurs photogénérés, ce qui explique la baisse du taux de recombinaison dans la couche active.

La Figure 4.16b montre que l'amélioration du champ électrique interne est due à une réduction de la discontinuité de bande de valence ΔE_V avec l'augmentation du gap.

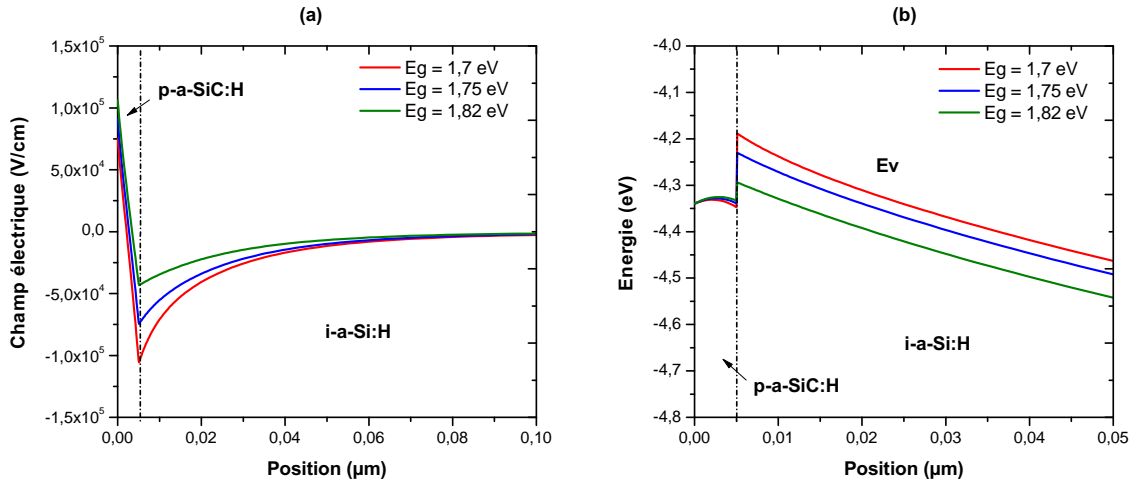


Figure 4.16 – Effet du gap de mobilité de la couche active de la cellule p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H sur : (a) le champ électrique et (b) le diagramme de bandes.

4.3.2 Optimisation de l'interface p-i de la cellule solaire p-i-n à base de a-Si:H

Les travaux expérimentaux et de simulation ont montré que la tension V_{co} est sensible à l'interface p-i de la cellule solaire p-i-n [131, 132]. Par conséquent, il est nécessaire de prêter une attention assez particulière à celle-ci [119]. Il s'agit en réalité d'une hétérojonction laissant apparaître des discontinuités de bande, ou « band offsets » en anglais, à la jonction des bandes de conduction et de valence des matériaux de p-a-SiC:H et de i-a-Si:H [119], comme illustré sur la Figure 4.17, et où est localisée une forte densité de défauts [129].

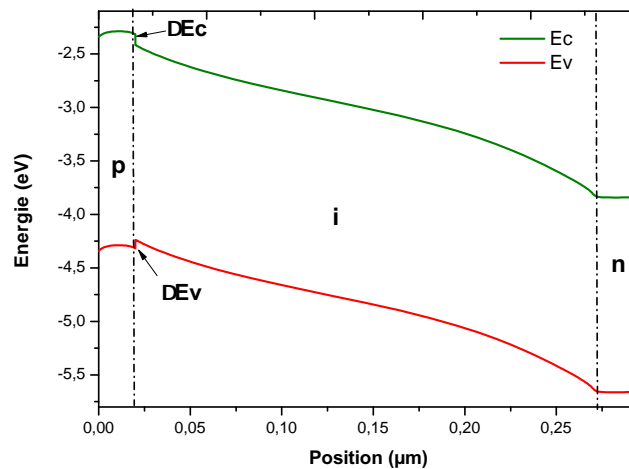


Figure 4.17 – Diagramme de bandes d'une cellule solaire p-i-n à base de a-Si:H simulée en conditions d'illumination AM1.5G à l'aide de l'AMPS-1D.

La discontinuité de bande de valence ΔE_V dépend essentiellement du gap et de l'affinité électronique de chacun des matériaux qui sont mis en contact, telle que :

$$\Delta E_V = \Delta E_g + \Delta\chi \quad (4.26)$$

où ΔE_g et $\Delta\chi$ correspondent à la différence des gaps et des affinités électroniques, respectivement.

Quant à la discontinuité de bande de conduction ΔE_C , elle résulte de la différence des affinités électroniques, telle que :

$$\Delta E_C = \Delta\chi \quad (4.27)$$

Ces discontinuités de bande affectent le champ électrique interne et du coup la collecte des porteurs. En effet, la discontinuité de bande de valence ΔE_V constitue une barrière de potentiel qui tend à entraver le mouvement des trous de la couche active vers la couche p [86]. Par conséquent, il se produit une accumulation des trous à l'interface p-i susceptible de modifier le profil du champ électrique et d'accroître le taux de recombinaison. Dans ce cas, il est nécessaire de réduire cette barrière pour faciliter le transport des trous. D'autre part, pour des tensions élevées ($>0,5$ V), le champ électrique à l'interface p-i devient insuffisant, ce qui en résulte une rétrodiffusion d'électrons photogénérés vers la région p où ils risquent de se recombiner rapidement en raison de la quantité importante de défauts localisée dans cette région. Pour agir contre cette rétrodiffusion, la discontinuité de bande de conduction ΔE_C doit être suffisamment importante de façon à repousser les électrons loin de l'interface p-i. Cette dernière est donc une région qui peut enregistrer un fort taux de recombinaison entraînant une diminution de la tension V_{co} et celle du facteur de forme FF [119].

4.3.2.1 Analyse de l'influence de l'interface p-i sur la tension de circuit ouvert V_{co}

Dans cette partie, nous allons illustrer l'influence de l'interface p-i sur les performances d'une cellule solaire p-i-n et en particulier sur la tension V_{co} , en simulant une cellule p-i-n à base de a-Si:H avec une interface p-i comportant une densité de défauts notée « defect p-i », comme illustré à la Figure 4.18. La présence de défauts à l'interface est due aux discontinuités de bande comme reporté dans la littérature. D'autre part, comme la couche active croît sur une couche p, l'interface possède un caractère p qui est également source de défauts. Les performances seront comparées à celles de la cellule p-i-n sans l'interface defectueuse.

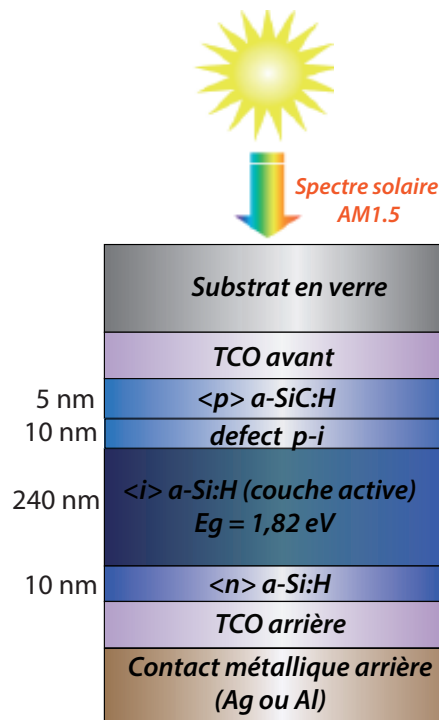


Figure 4.18 – Structure schématique de la cellule simple p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H avec une interface défectueuse « defect p-i » simulée en conditions d’illumination AM1.5G à l’aide de l’AMPS-1D.

Les paramètres de sortie issus des simulations de la cellule p-i-n avec et sans l’interface « defect p-i » sont reportés au tableau 4.2. Les résultats montrent que la tension V_{co} est en effet sensible à l’interface p-i. Elle est de 884 mV contre 916 mV pour une cellule p-i-n sans l’interface défectueuse. On constate également que les autres paramètres sont affectés par cette dernière.

Cellule p-i-n	V_{co} (V)	J_{cc} (mA/cm ²)	FF (%)	E_{ff} (%)
sans « defect p-i »	0,916	14,24	67	8,75
avec « defect p-i »	0,884	14,11	65,9	8,22

Tableau 4.2 – Comparaison entre les paramètres de sortie de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H avec et sans l’interface « defect p-i ».

La Figure 4.19 compare les taux de recombinaison en conditions de circuit ouvert ($V=V_{co}$) de la cellule p-i-n avec et sans l’interface « defect p-i ». On constate alors que l’interface « defect p-i » enregistre un fort taux de recombinaison, ce qui est en parfait accord avec la littérature [119]. Les pertes par recombinaison à l’interface limitent la tension V_{co} et affectent le facteur de forme FF. Cela se traduit par un plus faible rendement de conversion E_{ff} .

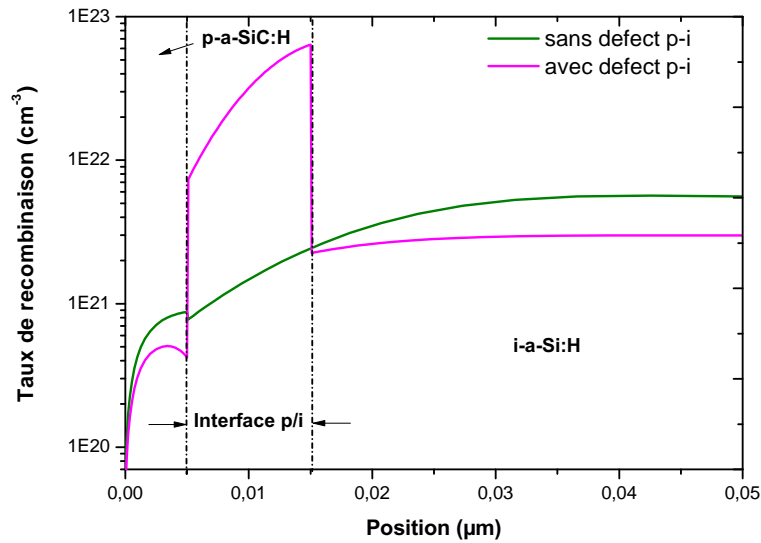


Figure 4.19 – Taux de recombinaison en conditions de circuit ouvert ($V=V_{co}$) de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H avec et sans interface « defect p-i » simulée en conditions d'illumination à l'aide de l'AMPS-1D.

La Figure 4.20a montre que le champ électrique est affecté par l'interface « defect p-i ». Pour cause, la discontinuité de bande de valence ΔE_V qui est plus forte comparée à la cellule p-i-n sans interface « defect p-i », comme illustré à la Figure 4.20b. Comme reporté dans la littérature, celle-ci constitue une barrière de potentiel qui entrave la migration des trous photogénérés vers la couche p. Il en résulte une accumulation des trous à l'interface « defect p-i » qui affectent le profil du champ électrique et du coup la collecte des porteurs. Cette accumulation contribue également à l'augmentation du taux de recombinaison.

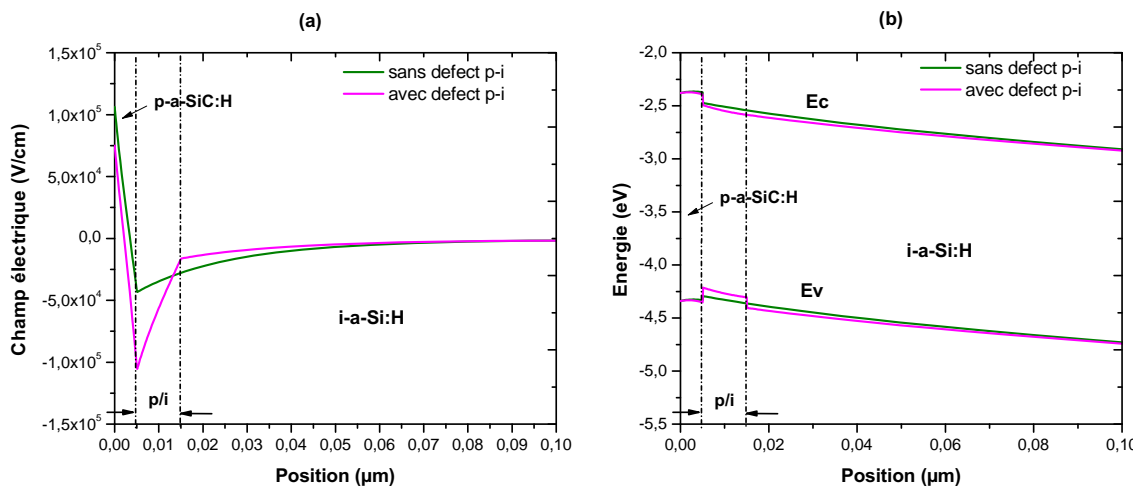


Figure 4.20 – Représentation du champ électrique (a) et du diagramme de bandes (b) de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H avec et sans interface « defect p-i » simulée en conditions d'illumination AM1.5G à l'aide de l'AMPS-1D.

On comprend alors qu'il est nécessaire d'optimiser l'interface p-i afin d'améliorer les performances de la cellule p-i-n à base de a-Si:H. De nombreux travaux de recherches ont été menés dans le but d'apporter des solutions pour réduire le taux de recombinaison à l'interface p-i. L'une des solutions consiste à optimiser les propriétés de la couche fenêtre p et celles de la couche active. En matière de couches fenêtres, différents matériaux ont été développés notamment le carbure de silicium amorphe hydrogéné dopé p (p-a-SiC:H) et le silicium microcristallin fluoré [133]. Une autre solution consiste à introduire une couche fine à base de matériau à large gap à l'interface p-i. Cette couche appelée couche buffer a pour effet d'ajuster les discontinuités de bandes, d'optimiser le champ électrique local dans cette région, d'empêcher la rétrodiffusion des électrons photogénérés vers la couche p [86] et de réduire le taux de recombinaison à l'interface p-i [119]. La couche buffer peut être réalisée à partir de matériaux comme a-Si:H ou de a-SiC:H à large gap, le silicium protocristallin [134], le nitrure de silicium amorphe hydrogéné (a-SiN:H) et l'oxyde de silicium amorphe hydrogéné (a-SiO:H) [135]. La couche buffer peut être intrinsèque, ou légèrement dopée, ou dont la concentration de dopant [86] ou la teneur de carbone [131] est de type graduel. Il est également nécessaire que la couche buffer présente une faible densité de défauts [39, 135], sinon elle pourrait occasionner des recombinaisons supplémentaires à l'interface p-i susceptible de nuire davantage au rendement de conversion [135].

4.3.2.2 Insertion d'une couche buffer à l'interface p-i

Dans notre étude, nous nous proposons d'optimiser l'interface « defect p-i » en insérant une couche buffer comme illustré à la Figure 4.21. Il s'agit d'une couche à base de a-SiC:H, de type intrinsèque comportant une faible densité de défauts et dont l'épaisseur est fixée à 2 nm. Le Tableau 4.3 compare les paramètres de sortie de la cellule solaire p-i-n simulée avec et sans couche buffer. Les résultats de simulation montrent que l'insertion d'une couche buffer à l'interface p-i contribue à l'amélioration de la tension V_{co} d'une valeur de 30 mV par rapport à la tension V_{co} de la p-i-n sans couche buffer. Les paramètres J_{cc} et FF voient également leur valeur augmentée. Par conséquent, la cellule p-i-n avec couche buffer affiche un bien meilleur rendement de conversion comparé à celui de la cellule sans couche buffer.

Cellule p-i-n	V_{co} (V)	J_{cc} (mA/cm ²)	FF(%)	E_{ff} (%)
sans buffer	0,884	14,11	65,9	8,22
avec buffer	0,914	14,22	66,2	8,6

Tableau 4.3 – Comparaison entre les paramètres de sortie de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H avec et sans couche buffer à l'interface p-i.

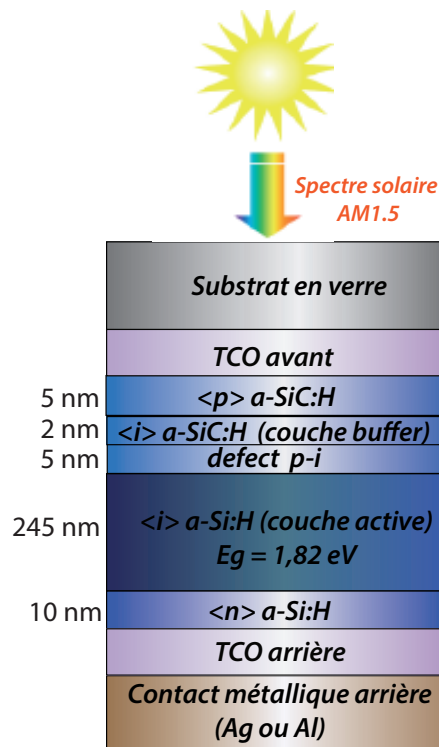


Figure 4.21 – Structure de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H avec une couche buffer i-a-SiC:H à l’interface p-i simulée en conditions d’illumination AM1.5G à l’aide de l’AMPS-1D.

La Figure 4.22 illustre le taux de recombinaison en conditions de circuit ouvert à $V=V_{co}$.

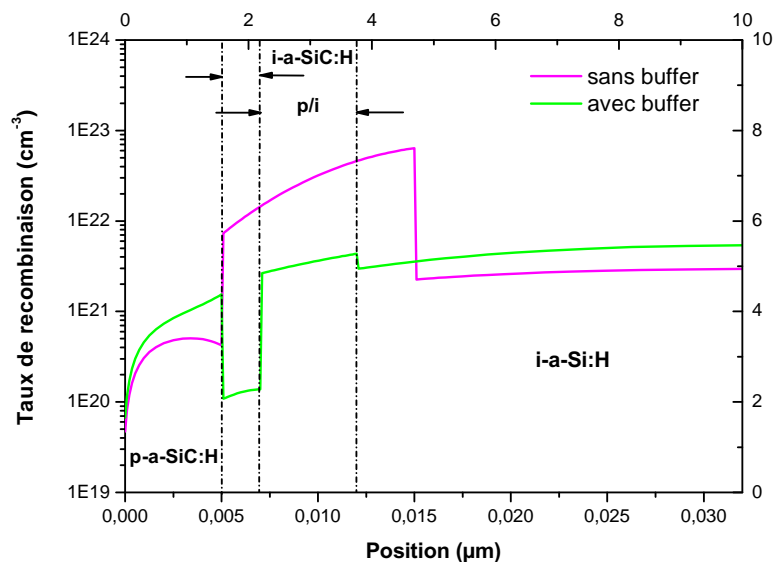


Figure 4.22 – Taux de recombinaison en conditions de circuit ouvert ($V=V_{co}$) de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H avec et sans couche buffer simulée en conditions d’illumination AM1.5G à l’aide de l’AMPS-1D.

On constate que le taux de recombinaison à l'interface p-i décroît fortement suite à l'insertion de la couche buffer, ce qui explique l'augmentation de la tension V_{co} et celle du facteur de forme FF. Cela est en accord avec la littérature [119].

La réduction du taux de recombinaison est due à un meilleur profil du champ électrique interne dans la cellule p-i-n avec couche buffer, comme illustré à la Figure 4.23a. La Figure 4.23b montre en effet une réduction de la discontinuité de bande de valence ΔE_V . Par conséquent, le passage des trous en direction de la couche p est rendu plus facile, ce qui réduit leur accumulation à l'interface comme le montre clairement la Figure 4.24 illustrant la densité des porteurs trous à l'interface de la cellule avec et sans couche buffer.

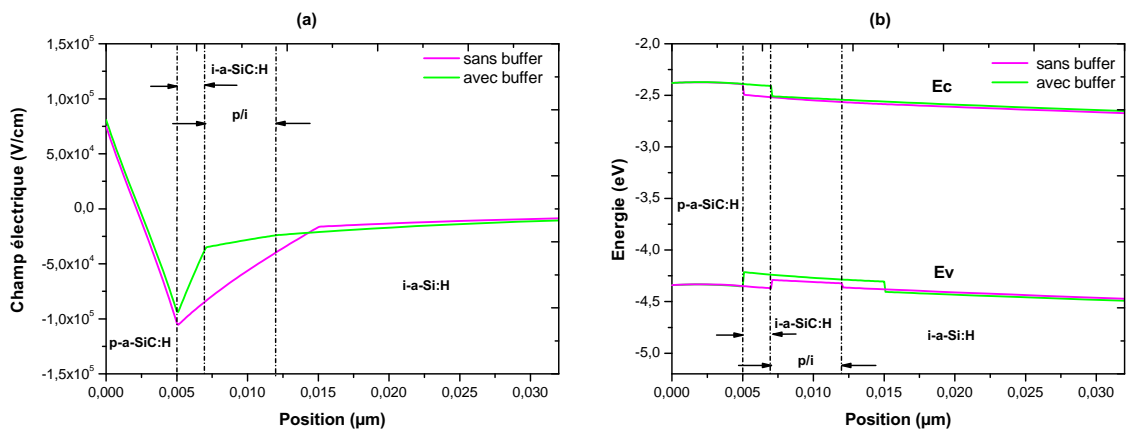


Figure 4.23 – Représentation du champ électrique (a) et du diagramme de bandes (b) de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H avec et sans couche buffer simulée en conditions d'illumination AM1.5G à l'aide de l'AMPS-1D.

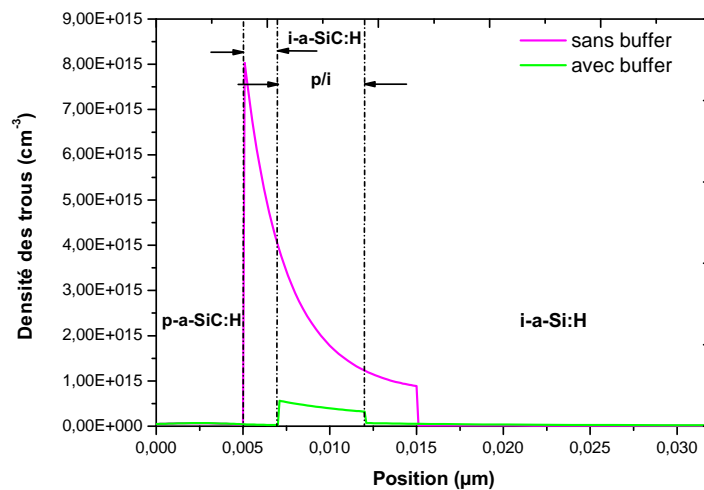


Figure 4.24 – Représentation de la densité des porteurs trous de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H avec et sans couche buffer simulée en conditions d'illumination AM1.5G à l'aide de l'AMPS-1D.

4.3.3 Optimisation de l'épaisseur de la couche active de la cellule p-i-n à base de a-Si:H

On se propose maintenant d'optimiser l'épaisseur d_i de la couche active de la cellule solaire p-i-n pour obtenir de meilleures performances. Pour ce faire, nous allons simuler la cellule de la Figure 4.21 pour différentes valeurs d_i allant de 100 nm à 600 nm. Précisons toutefois que la structure de la cellule a été simplifiée en supprimant son interface « defect p-i » et sa couche buffer.

La Figure 4.25 représente les caractéristiques $J(V)$ de la cellule solaire p-i-n en conditions d'illumination AM1.5G pour différentes valeurs de d_i . A partir de ces caractéristiques, les paramètres V_{co} , J_{cc} , FF et E_{ff} ont été extraits puis reportés sur des graphes en fonction de l'épaisseur d_i , comme illustré à la Figure 4.26.

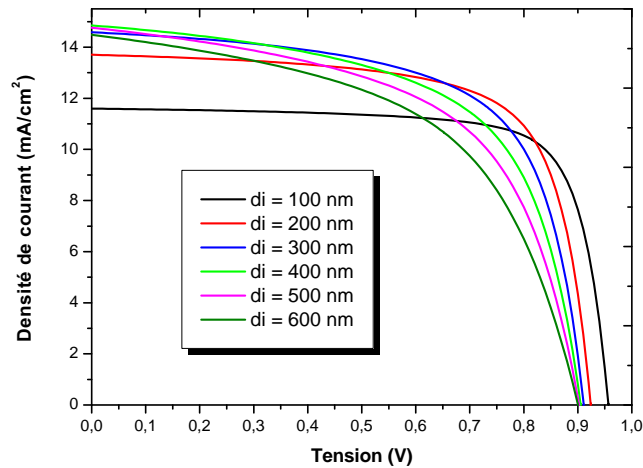


Figure 4.25 – Caractéristiques $J(V)$ de la cellule p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H en conditions d'illumination AM1.5G simulée à l'aide l'AMPS-1D.

On constate alors que l'augmentation l'épaisseur d_i s'accompagne d'une diminution progressive de la tension V_{co} et du facteur de forme FF. La densité de courant de court-circuit J_{cc} , quant à elle, augmente jusqu'à la valeur de 14,85 mA à 400 nm puis décroît à mesure que l'épaisseur d_i augmente. Ce qui est en accord avec la littérature [136]. La diminution de V_{co} avec l'épaisseur d_i peut être attribuée à une augmentation de la densité de défauts dans la couche active. Une quantité plus importante de défauts affecte le champ électrique et par conséquent le pouvoir de collecte des porteurs [137]. Quant à la diminution du facteur de forme FF, elle peut être due à l'augmentation de la résistance série R_s dans la cellule.

La densité de courant J_{cc} est directement liée au rendement quantique (ou la réponse spectrale) de la cellule solaire, comme nous l'avons vu au chapitre 1. La Figure 4.27 montre le rendement quantique QE en conditions de court-circuit (à $V=0V$) pour différentes épaisseurs d_i .

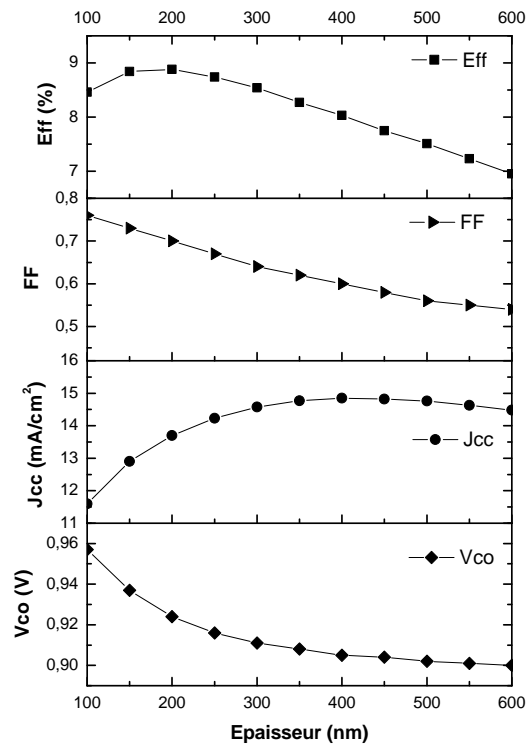


Figure 4.26 – Paramètres J(V) de la cellule p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H pour différentes épaisseurs de la couche active.

D’abord, on voit que la cellule absorbe les longueurs d’ondes comprises entre 350 nm et 700 nm de la partie visible du spectre solaire. Cela s’explique par le fait que le a-Si:H possède un fort coefficient d’absorption dans cette partie du spectre.

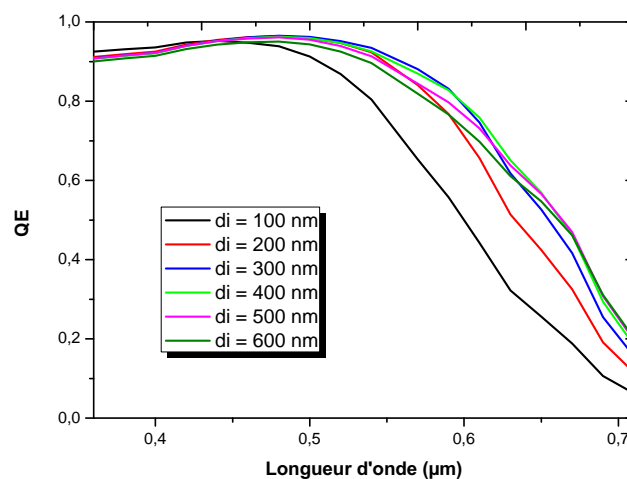


Figure 4.27 – Rendement quantique de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H simulée en conditions de court-circuit ($V=0$) et d’illumination AM1.5G à l’aide de l’AMPS-1D.

On constate ensuite que le rendement quantique commence à augmenter avec l'épaisseur d_i pour atteindre un maximum à $d_i = 400$ nm qui correspond à la densité de courant J_{cc} de 14,85 mA, puis baisse quand d_i augmente. En effet, quand l'épaisseur d_i augmente, on a une meilleure absorption optique qui donne lieu à plus de photoporteurs et donc un plus grand photocourant. Cependant, au delà de 400 nm d'épaisseur, il y a probablement une perte de porteurs photogénérés suite aux recombinaisons dues à la présence d'une plus grande quantité de défauts, ce qui se traduit par une baisse du rendement quantique et donc de la densité de courant J_{cc} .

La cellule solaire affiche un rendement de conversion maximal de 8,9% pour une épaisseur optimale de 200 nm avec $V_{co} = 924$ mV, $J_{cc} = 13,7$ mA/cm² et FF = 70%.

Le rendement de conversion initial d'une cellule solaire p-i-n à base de a-Si:H soumise à l'illumination diminue à cause de l'effet SWE. Pour garder des rendements plus stables, l'épaisseur de la couche active d'une cellule p-i-n à base de a-Si:H doit rester inférieure à 300 nm afin que le champ électrique interne de la cellule soit plus fort et donc moins sensible à l'effet SWE [48]. Cependant, une faible épaisseur de couche active conduit à une faible absorption optique et donc une faible densité de courant. Par conséquent, le rendement d'une cellule solaire simple p-i-n à base de a-Si:H est assez faible et reste limité. Le meilleur rendement stabilisé d'une cellule p-i-n jusqu'à maintenant obtenu en laboratoire est de 10,02% [9]. Dès lors, un compromis doit être trouvé entre le pouvoir de collecte et la génération des porteurs dans une cellule à simple jonction p-i-n à base de a-Si:H. Pour cela, des solutions ont été développées comme les techniques de piégeage de la lumière qui permettent d'augmenter le courant photogénéré tout en gardant des épaisseurs de couche active aussi mince que possible, et l'approche multijonction qui vise à améliorer la tension V_{co} . C'est cette dernière approche que nous développerons dans cette étude.

4.4 Simulation et optimisation d'une cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de μ c-Si:H

La Figure 4.28 représente la structure schématique d'une cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de μ c-Si:H simulée à l'aide de l'AMPS-1D. Les couches n et p doivent être fortement dopées et leur épaisseur doit être la plus faible possible, et cela pour les mêmes raisons que celles évoquées pour la cellule p-i-n à base de a-Si:H. Dans nos simulations, l'épaisseur des couches dopées est fixée à 20 nm, comme cela est indiqué sur la Figure 4.28.

En raison du faible coefficient d'absorption du μ c-Si:H, il est nécessaire que la couche active soit plus épaisse, soit de l'ordre de quelques micromètres, afin de

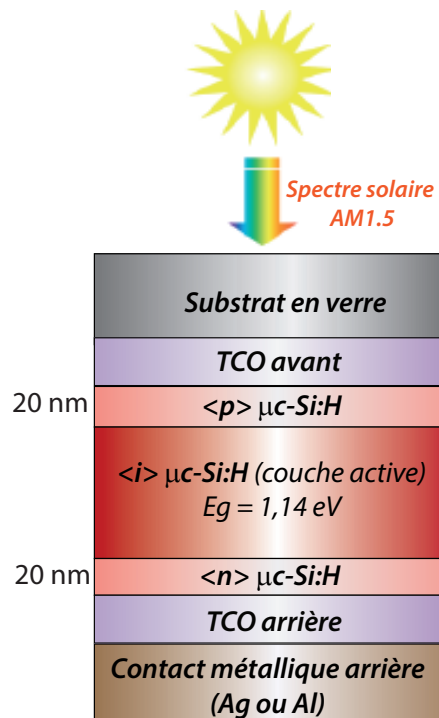


Figure 4.28 – Structure schématique de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de $\mu\text{c-Si:H}$ simulée en conditions d'illumination AM1.5G à l'aide l'AMPS-1D.

garantir une plus grande absorption du rayonnement solaire dans la cellule micro-cristalline [138]. Le recours aux fortes épaisseurs n'a pas d'impact en termes de stabilité pour ce qui est du $\mu\text{c-Si:H}$ puisque celui-ci ne présente peu ou presque pas de signes de dégradation induite par l'éclairement du à l'effet SWE.

La Figure 4.29 montre les caractéristiques $J(V)$ de la cellule solaire p-i-n à base de $\mu\text{c-Si:H}$ en conditions d'illumination AM1.5G pour différentes épaisseurs d_i de la couche active variant de 0,5 à 2,1 μm .

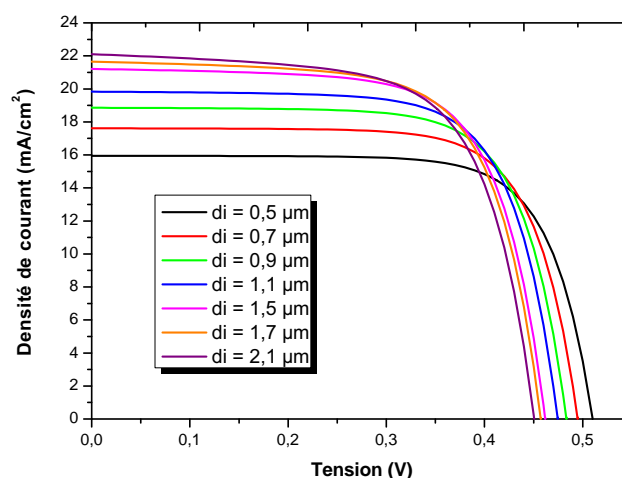


Figure 4.29 – Caractéristiques $J(V)$ de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de $\mu\text{c-Si:H}$ simulée en conditions d'illumination AM1.5G à l'aide de l'AMPS-1D.

Les paramètres de sortie issus des courbes $J(V)$ sont reportés sur la Figure 4.30 en fonction de l'épaisseur d_i . On voit que la tension V_{co} et le facteur de forme FF diminuent avec l'augmentation de l'épaisseur d_i . Cela traduit en fait les limites liées aux propriétés volumiques du matériau. On remarquera par ailleurs que les valeurs de la tension V_{co} sont plus faibles comparées à celles de la p-i-n à base de a-Si:H. Quant à la densité de courant J_{cc} , elle augmente avec l'épaisseur d_i . Cela s'explique par une meilleure absorption optique comme le montre la Figure 4.31 illustrant le rendement quantique QE en condition de court-circuit ($V=0V$) en fonction de l'épaisseur d_i .

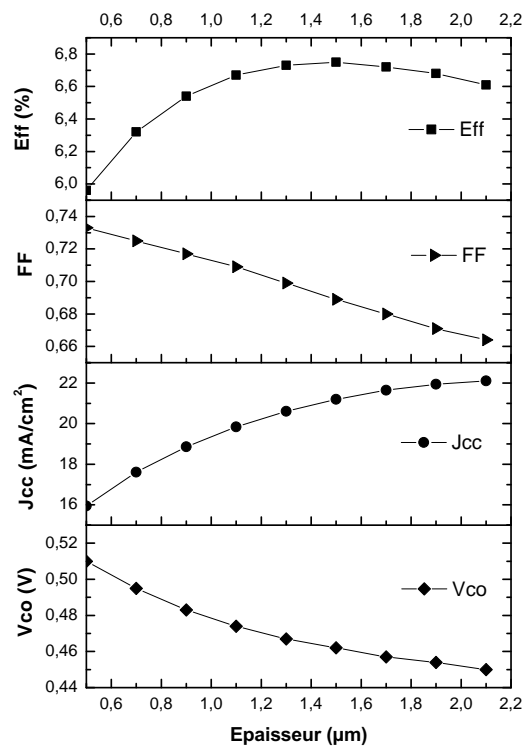


Figure 4.30 – Paramètres $J(V)$ de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de $\mu\text{c-Si:H}$ pour différentes épaisseurs de la couche active.

Les valeurs de densité de courant J_{cc} sont plus élevées comparées à celles de la cellule en a-Si:H. En effet, outre une absorption optique qui augmente avec l'épaisseur d_i , la réponse spectrale s'étend sur une plus large plage du spectre solaire comparée à celle de la cellule p-i-n amorphe. En effet, de par son petit gap de 1,14 eV, le $\mu\text{c-Si:H}$ est en mesure d'absorber les grandes longueurs d'ondes qui correspondent aux régions du rouge et du proche infrarouge comprises entre 600 nm et 1000 nm du spectre solaire. Ce qui est en accord avec la littérature [139].

Le rendement de conversion de la cellule solaire atteint une valeur maximale de 6,75 % à $d_i = 1,5 \mu\text{m}$ avec $V_{co} = 462 \text{ mV}$, $J_{cc} = 21,2 \text{ mA}/\text{cm}^2$ et $FF = 68,9 \%$.

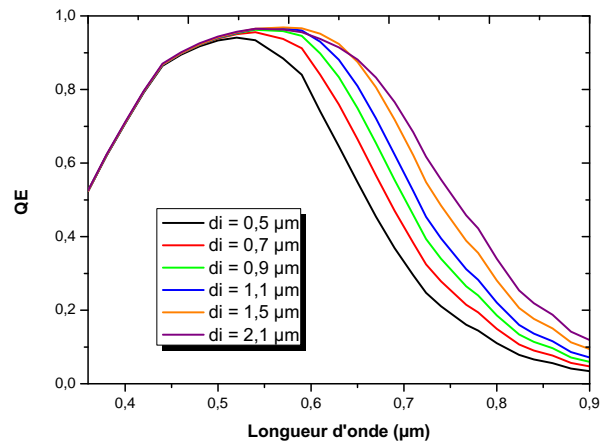


Figure 4.31 – Rendement quantique de la cellule solaire p-i-n à simple jonction à base de $\mu\text{c-Si:H}$ en conditions de court-circuit ($V=0$) et d'illumination AM1.5G pour différentes épaisseurs de couche active.

Toutefois, il faut souligner que les cellules p-i-n à simple jonction microcristallines ne présentent pas un intérêt économique à cause des vitesses de dépôts relativement faibles des couches actives. Leur vraie valeur ajoutée apparaît lorsqu'elles sont combinées aux cellules p-i-n amorphes pour former des configurations plus complexes à savoir les structures à multijonctions [114]. En effet, de par sa stabilité, son gap étroit de 1,14 eV et son fort coefficient d'absorption dans le rouge et le proche infrarouge, le $\mu\text{c-Si:H}$ peut être utilisé avantageusement comme couches actives des cellules inférieures de cellules solaires tandem et triple-jonction [75, 140]. Dans la partie qui suit, nous aborderons l'approche multijonction et analyserons à l'aide de la simulation les configurations tandem et triple-jonction.

4.5 Simulation des cellules solaires à structure multijonction

4.5.1 Principe d'une structure à multijonction

Les structures solaires à multijonction constituent un empilement de cellules solaires dont le gap des couches actives décroît successivement à mesure que le rayonnement solaire pénètre dans la structure si bien que chaque cellule absorbe une partie du spectre solaire, comme illustré à la Figure 4.32. La combinaison de matériaux de gap différents permet de tirer le meilleur parti du spectre solaire, et il en résulte de meilleurs rendements de conversion photovoltaïque.

En technologie couches minces de silicium, la multijonction combine une cellule solaire à base de a-Si:H avec une ou plusieurs cellules dont le matériau peut être le $\mu\text{-Si:H}$ [75], et/ou l'alliage a-SiGe:H [141]. Ces différentes cellules sont connectées en série dites sous-cellules. On parlera de cellule tandem pour désigner une structure à deux sous-cellules et une triple-jonction, une structure à trois sous-cellules.

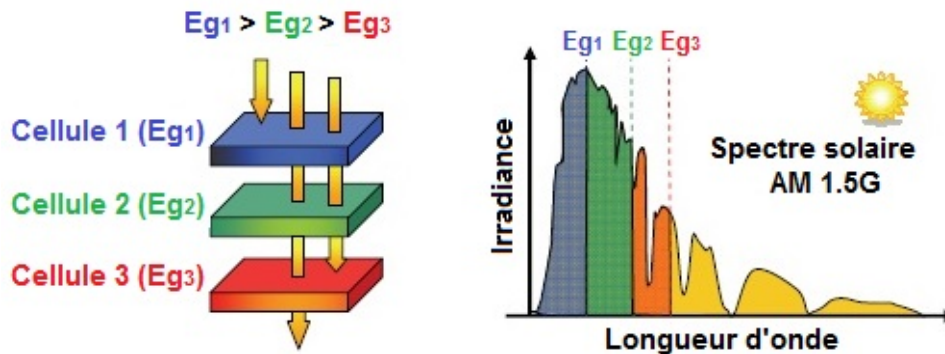


Figure 4.32 – Schéma illustrant le principe d'une multijonction [142].

Dans de telles structures, les tensions s'ajoutent tandis que le courant total est limité par la sous-cellule qui produit le courant le plus faible. Dans la conception d'une multijonction, deux conditions sont requises [39] :

1. La densité de courant générée au point maximal de puissance (MPP) dans chacune des sous-cellules doit être la même (current matching en anglais) ;
2. La connexion entre les sous-cellules adjacentes doit être caractérisée par de faibles pertes optiques et électriques.

Pour satisfaire au premier point, les différentes couches actives de la structure doivent être optimisées [143]. Dans nos simulations, cette optimisation consiste à ajuster minutieusement l'épaisseur des couches actives de manière à générer la même densité de courant dans chacune des sous-cellules [39].

Le deuxième point concerne l'interface entre les sous-cellules. Celle-ci constitue en fait une jonction n/p polarisée en inverse quand la cellule opère en polarisation directe. Cependant, pour un bon fonctionnement de la cellule, la jonction n/p doit assurer un contact ohmique. Pour ce faire, la connexion des sous-cellules adjacentes de la multijonction doit être établie via une jonction tunnel ou TRJ (Tunnel Recombination Junction), qui consiste en général en deux couches n et p fortement dopées et de faibles épaisseurs. Ce qui permet de réduire les pertes électriques et optiques. De plus, la TRJ doit intégrer une forte densité de défauts dans le milieu du gap. Les électrons photogénérés de la sous-cellule supérieure et les trous photogénérés de la sous-cellule inférieure, en se déplaçant respectivement vers les couches n et p de la TRJ, sont acheminés vers les défauts par effet tunnel, comme illustré dans la Figure 4.33, où ils subiront de fortes recombinaisons.

Ces dernières permettent de conditionner le flux du courant à travers la structure multijonction [39]. Il s'agit ici d'un mécanisme de recombinaison dit non localisé par opposition au mécanisme de recombinaison usuel dit localisé. Le premier mécanisme de recombinaison est qualifié de « bon » alors que le deuxième est qualifié de « mauvais » puisqu'il est à l'origine des pertes dans la cellule solaire causant la diminution du rendement de conversion photovoltaïque [144].

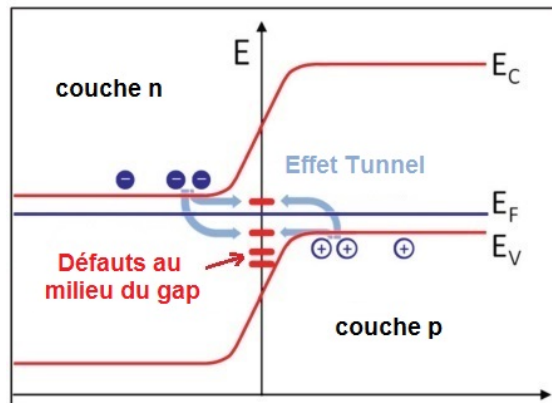


Figure 4.33 – Diagramme de bandes d'une jonction tunnel (TRJ) d'une cellule solaire à structure multijonction [145].

Sans la TRJ, une accumulation des porteurs se produirait à l'interface des sous-cellules adjacentes provoquant alors une distorsion du champ électrique dans la structure et du coup une baisse du potentiel de diffusion. Il en résulte ainsi une dégradation des performances de la cellule solaire [146]. Il est important que la TRJ soit de qualité supérieure si l'on veut optimiser les rendements de conversion des cellules à structure multijonction [147].

Dans le cadre de ce travail, nous nous proposons de simuler et d'optimiser une cellule solaire tandem micromorphe « a-Si:H/ μ c-Si:H » et une cellule solaire triple-jonction « a-Si:H/ μ c-Si:H/ μ c-Si:H ».

4.5.2 Simulation et optimisation d'une cellule solaire tandem micromorphe à l'aide de l'AMPS-1D

La cellule solaire micromorphe est un concept de cellule tandem qui fut développé en 1994 par l'un des laboratoires de l'Institut de Microtechnologie (IMT) de l'Université de Neuchâtel en Suisse [76], à l'aide de la technique VHF-GD [79]. Ce concept consiste à empiler deux cellules : une cellule supérieure à base de a-Si:H et une cellule inférieure à base de μ c-Si:H. Il s'agit en fait d'une structure tandem entièrement à base de silicium. Le terme micromorphe est une contraction des termes « microcristallin » et « amorphe ».

Nous nous proposons de simuler et d'optimiser la structure tandem micromorphe, illustrée à la Figure 4.34 à l'aide de l'AMPS-1D.

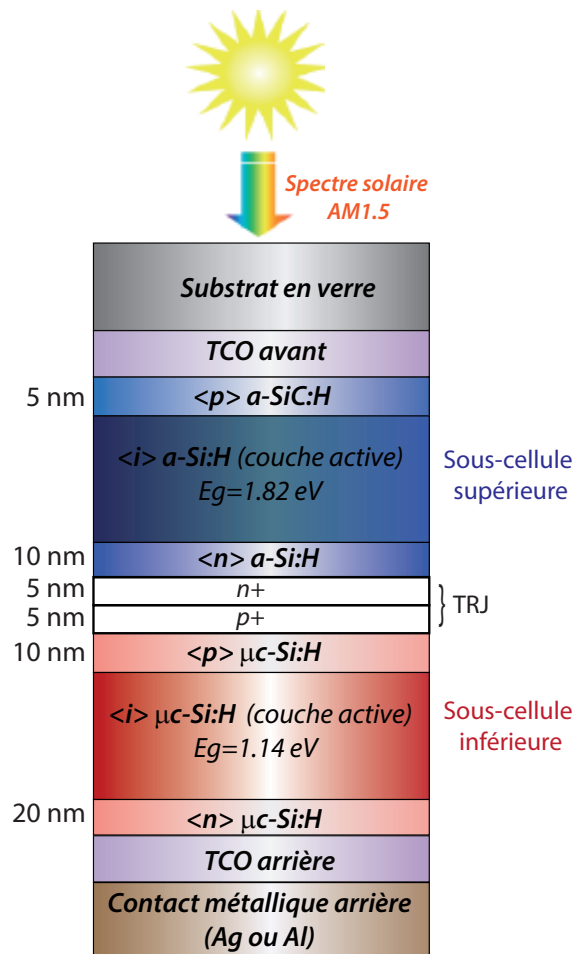


Figure 4.34 – Structure schématique de la tandem micromorphe a-Si:H/ $\mu\text{c-Si:H}$ avec une TRJ artificielle.

Il s'agit d'une configuration pin/pin (superstrate). La sous-cellule supérieure et la sous-cellule inférieure correspondent aux cellules p-i-n à base de a-Si:H et à base de $\mu\text{c-Si:H}$ respectivement qui ont fait l'objet d'une optimisation précédemment dans les sections 4.3 et 4.4. Sachant que l'AMPS-1D ne repose que sur le modèle de transport classique de drift-diffusion et qu'aucun modèle de courant par effet tunnel n'est implémenté, la simulation des structures à multijonction ne peut être effectuée que si les sous-cellules adjacentes sont interconnectées via une TRJ artificielle n^+/p^+ [127] qui doit assurer un bon contact ohmique. Cette TRJ doit permettre d'acheminer les porteurs photogénérés entre les sous-cellules par effet tunnel jusqu'à son interface où ils subiront un fort taux de recombinaisons non localisées. Les couches dopées n^+ et p^+ de la TRJ sont à base de $\mu\text{c-Si:H}$ qui permet de réaliser de forts niveaux de dopage. D'autre part, ce matériau est à faible gap qui contribue à l'augmentation du taux de recombinaison [148]. Les couches dopées sont fixées à de faibles épaisseurs et intègrent une forte densité de défauts de type midgap. Les différents paramètres de

la TRJ sont reportés dans les Tableaux A.2 et A.3. L'optimisation de la TRJ passe par un choix judicieux de ses paramètres pour répondre aux exigences auxquelles elle doit satisfaire.

Nous allons maintenant ajuster l'épaisseur des couches actives i-a-Si:H et i- μ c-Si:H jusqu'à établir un current matching dans la structure tandem. Comme l'AMPS-1D n'intègre pas d'outil spécifique pour effectuer une telle optimisation, la solution consiste à ajuster les épaisseurs de manière à obtenir le meilleur rendement de conversion photovoltaïque pour la structure tandem micromorphe.

Pour ce faire, nous allons procéder comme suit [149] :

- maintenir constante l'épaisseur de la couche i- μ c-Si:H et ajuster l'épaisseur de la couche i-a-Si:H jusqu'à l'obtention d'un maximum de rendement de conversion.
- garder l'épaisseur de la couche i-a-Si:H inchangée et ajuster l'épaisseur de la couche i- μ c-Si:H jusqu'à l'obtention d'un nouveau maximum de rendement de conversion.

Il en résulte un rendement de conversion maximum de 10,49 % pour les épaisseurs $d_i(\text{a-Si:H}) = 200 \text{ nm}$ et $d_i(\mu\text{c-Si:H}) = 2 \mu\text{m}$.

La Figure 4.35 illustre la caractéristique $J(V)$ de la cellule tandem micromorphe.

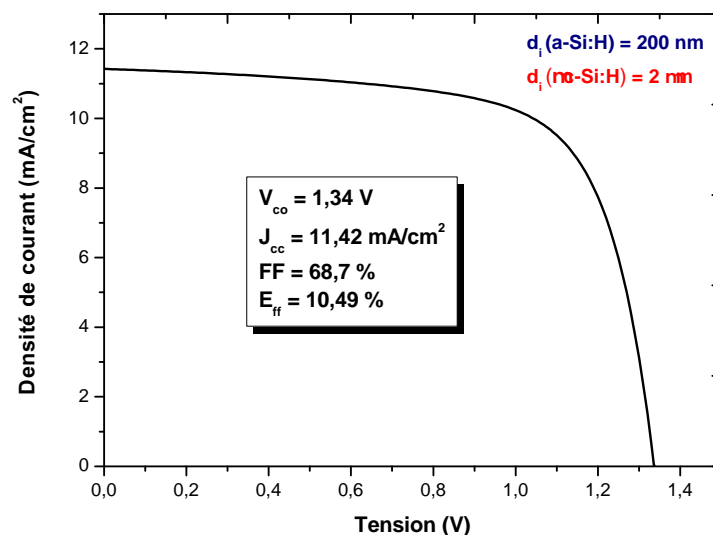


Figure 4.35 – Caractéristique $J(V)$ de la cellule tandem micromorphe en conditions d'illumination AM1.5G simulée à l'aide de l'AMPS-1D.

Cette caractéristique est comparée à celles des cellules p-i-n à simple jonction à base de a-Si:H et de μ c-Si:H, comme illustré à la Figure 4.36. On constate que le rendement de la tandem micromorphe est beaucoup plus élevé comparé à celui des cellules p-i-n à simple jonction.

Cela est dû essentiellement à une amélioration de la tension V_{co} qui est de 1,34 V. On constate aussi que cette tension est à peu près égale à la somme entre les tensions $V_{co,a-Si:H} = 924 \text{ mV}$ et $V_{co,\mu c-Si:H} = 452 \text{ mV}$. Ce qui montre que la TRJ assure un bon contact ohmique entre les sous-cellules adjacentes. Quant à la densité de courant J_{cc} , elle est de $11,42 \text{ mA/cm}^2$, ce qui est plus faible comparé aux cellules p-i-n à simple jonction. Toutefois, il s'agit de la même densité de courant qui circule dans les sous-cellules amorphe et microcristalline. En effet, il y a lieu de distinguer entre les caractéristiques des cellules p-i-n à simple jonction prises séparément des caractéristiques des sous-cellules que l'AMPS-1D ne peut pas simuler. Le facteur de forme FF de la cellule tandem est de 68,7%. Les résultats de simulation sont en accord avec ceux qui sont reportés dans la littérature [150].

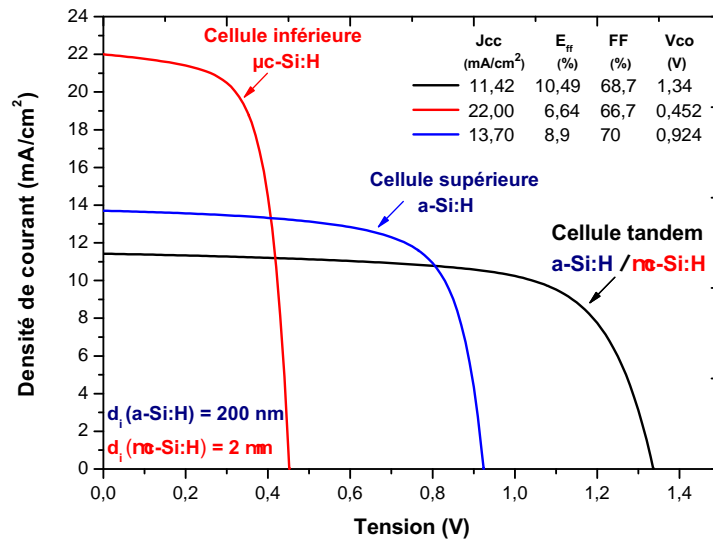


Figure 4.36 – Comparaison entre les caractéristiques des cellules tandem micro-morphe, p-i-n à base de a-Si:H ($d_i=200 \text{ nm}$) et p-i-n à base de μc -Si:H ($d_i=2 \mu\text{m}$).

La Figure 4.37a illustre le diagramme de bandes de la structure tandem micro-morphe. On voit qu'au niveau de la TRJ, il y a un rapprochement des quasi-niveaux de Fermi E_{fn} et E_{fp} , ce qui en est en accord avec la littérature [149]. Ce rapprochement favorise le transport et le processus de recombinaison par effet tunnel des porteurs et montre que la TRJ a bien été optimisée. On peut également constater qu'un champ intense règne à l'interface de la TRJ comme le montre la Figure 4.37b. La simulation montre que ce champ est insensible aux variations de la tension de polarisation, ce qui est en accord avec la littérature [151].

La valeur élevée du V_{co} est attribuée à une meilleure exploitation du spectre solaire comme en témoigne la courbe du rendement quantique de la structure tandem micromorphe illustrée à la Figure 4.38. Cela s'explique par le fait que la sous-cellule

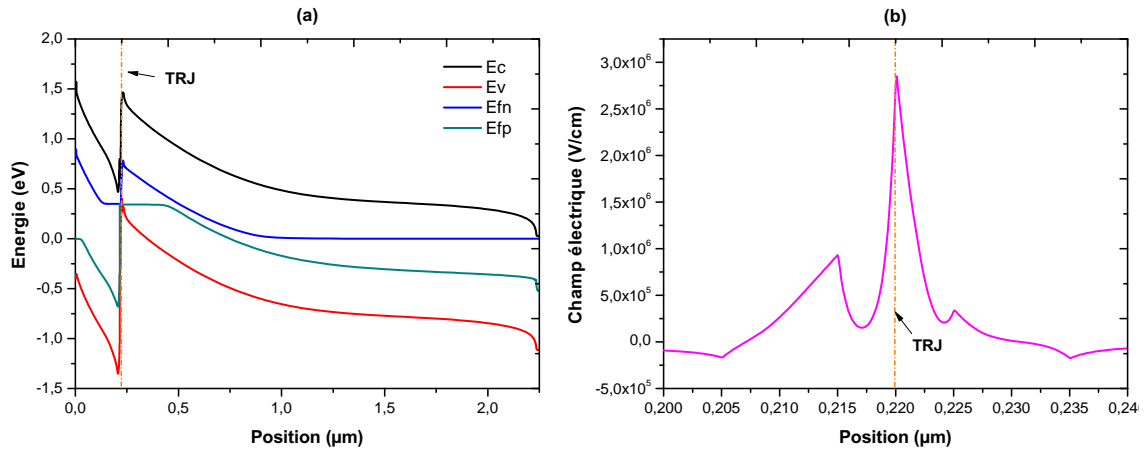


Figure 4.37 – Représentation du diagramme de bandes (a) et du champ électrique (b) de la tandem micromorphe simulée en condition d’illumination AM1.5G à l’aide de l’AMPS-1D.

p-i-n à base de a-Si:H absorbe les courtes longueurs d’ondes du visible et laisse passer les grandes longueurs du rouge et du proche infrarouge qui sont à leur tour absorbées par la sous-cellule p-i-n à base de $\mu\text{c-Si:H}$.

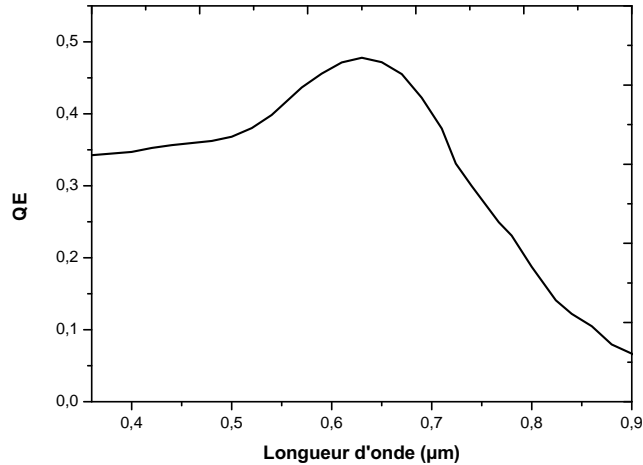


Figure 4.38 – Rendement quantique de la cellule tandem micromorphe simulée en conditions d’illumination AM1.5G et de court-circuit ($V=0V$) à l’aide de l’AMPS-1D.

Nos travaux de simulation sur la tandem micromorphe ont fait l’objet d’une publication dans le journal « Molecular Crystals and Liquid Crystals » [152].

4.5.3 Simulation de la cellule solaire tandem micromorphe à l'aide des logiciels wxAMPS

Sachant que le logiciel wxAMPS2 intègre un modèle de courant d'effet tunnel assisté par les défauts (TAT), les porteurs photogénérés peuvent être transportés entre les couches dopées n et p par effet tunnel jusqu'aux défauts. Par conséquent l'effet de la TRJ peut être directement simulée sans avoir recours à l'insertion d'une TRJ artificielle entre les sous-cellules adjacentes de la tandem ou en général d'une multijonction. Cela permet d'améliorer la stabilité de la simulation qui est en revanche plus difficile à obtenir avec l'AMPS-1D [127].

Nous allons reprendre la structure tandem micromorphe de la Figure 4.34 mais cette fois-ci sans la TRJ artificielle, comme illustré à la Figure 4.39, et cela pour une simulation et une optimisation à l'aide des logiciels wxAMPS.

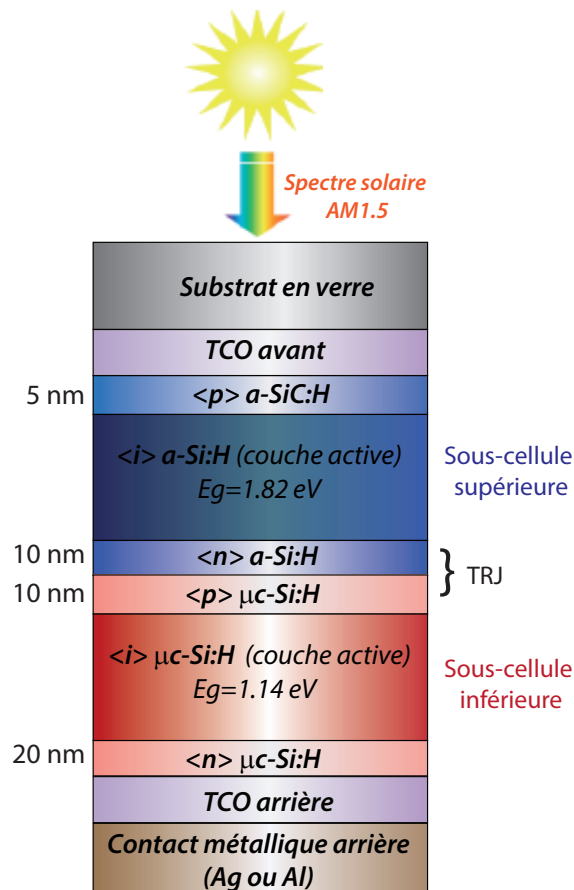


Figure 4.39 – Structure schématique de la tandem micromorphe a-Si:H/ μ c-Si:H simulée en conditions d'illumination AM1.5G à l'aide des logiciels wxAMPS.

La Figure 4.40a montre les courbes $J(V)$ des sous-cellules supérieure (en bleu) et inférieure (en rouge) et la courbe pseudo $J(V)$ de la structure tandem micromorphe (en noir), qui sont issues de l'analyse de sous-cellules à l'aide du wxAMPS3. On constate alors que les densités de courant au point MPP ne sont pas parfaites.

tement égaux. La Figure 4.40b illustre la courbe $J(V)$ de la cellule tandem micromorphe simulée à l'aide du wxAMPS2 en appliquant le modèle TAT. On constate que les performances photovoltaïques sont un peu différentes de celles obtenues avec l'AMPS-1D.

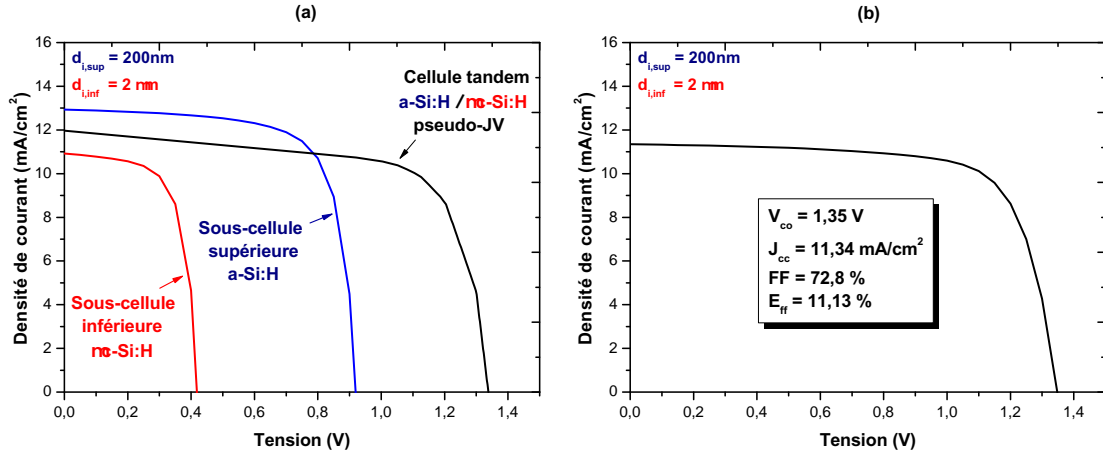


Figure 4.40 – Caractéristiques $J(V)$ de la cellule tandem micromorphe en condition d'illumination AM1.5G issues de l'analyse de sous cellules à l'aide du wxAMPS3 (a) et de la simulation à l'aide du wxAMPS2 (b).

Dans ce cas, nous allons procéder à un réajustement de l'épaisseur des couches actives jusqu'à l'obtention d'un current matching en se basant sur l'analyse de sous-cellules avec le wxAMPS3.

Comme en témoigne la Figure 4.41a, la condition du current matching est satisfaite pour les épaisseurs $d_{i,sup} = 150\text{ nm}$ et $d_{i,inf} = 2\text{ }\mu\text{m}$ des sous-cellules supérieure et inférieure, respectivement.

La Figure 4.41b montre la caractéristique $J(V)$ ainsi que les performances photovoltaïques de la tandem micromorphe simulée à l'aide du wxAMPS2 en appliquant le modèle TAT.

Le Tableau 4.4 compare entre les performances de la cellule tandem micromorphe avant et après optimisation en utilisant les logiciels wxAMPS. Il en résulte de l'optimisation de l'épaisseur des couches actives des sous-cellules une amélioration des performances photovoltaïques.

Cellule tandem micromorphe	$V_{co}(V)$	$J_{cc}(\text{mA}/\text{cm}^2)$	FF(%)	$E_{ff}(\%)$
non optimisée	1,35	11,34	72,8	11,13
optimisée	1,36	12,1	71,25	11,73

Tableau 4.4 – Performances de la cellule tandem micromorphe avant et après optimisation en utilisant les logiciels wxAMPS.

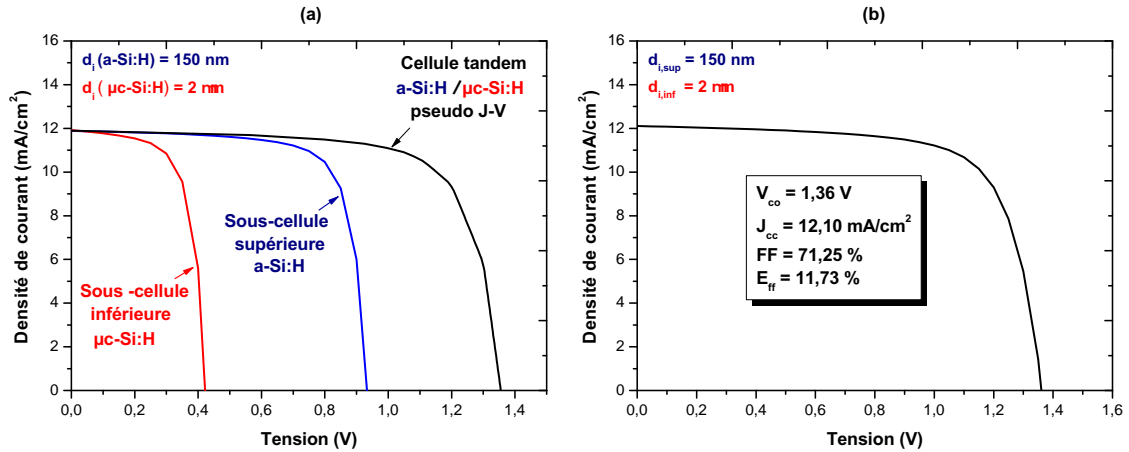


Figure 4.41 – Caractéristiques $J(V)$ de la cellule tandem micromorphe optimisée en condition d'illumination AM1.5G issues de l'analyse de sous cellules sous wxAMPS3 (a) et de la simulation à l'aide du wxAMPS2 (b).

Les tensions V_{co} de chaque sous-cellule peuvent être extraites à partir des courbes $J(V)$ de la Figure 4.41a. Elles ont pour valeur : $V_{co,sup} = 930$ mV et $V_{co,inf} = 420$ mV. On constate que la somme de ces deux tensions correspond à peu près à la valeur de $V_{co} = 1,36$ V de la structure tandem micromorphe. Cela montre que la TRJ assure un bon contact ohmique et fournit un nombre suffisant de centres de recombinaison. Ce qui est en accord avec la littérature [153].

La cellule tandem micromorphe affiche un rendement de conversion de 11,73 % avec une densité de courant de court-circuit $J_{cc} = 12,10$ mA/cm² et un facteur de forme $FF = 71,25$ %. Ce qui est en accord avec les résultats de simulation et expérimentaux publiés dans la littérature [154–156].

La Figure 4.42 représente les rendements quantiques QE_{sup} (en bleu) et QE_{inf} (en rouge) des sous-cellules supérieure et inférieure, respectivement obtenues à partir de l'analyse de sous-cellule de la tandem micromorphe optimisée à l'aide du wxAMPS3. Il en ressort de ces courbes que chaque sous-cellule absorbe une partie du spectre solaire. La cellule supérieure à base de a-Si:H dont le gap est de 1,82 eV absorbe les courtes longueurs d'ondes de la zone du visible (350 à 600 nm) alors que la cellule inférieure à base de µc-Si:H dont le gap est de 1,14 eV se charge d'absorber les grandes longueurs d'ondes de la zone du rouge et du proche infrarouge (600 à 1000 nm) qui ont traversé la sous-cellule supérieure. Il en résulte une meilleure exploitation du spectre solaire par la cellule tandem micromorphe. Ce qui explique l'amélioration de la tension V_{co} et du coup celle du rendement de conversion photovoltaïque.

La Figure 4.43a montre le diagramme de bandes correspondant à la cellule solaire micromorphe avec les pseudos niveaux de Fermi E_{fn} et E_{fp} . On constate que ces derniers sont proches l'un de l'autre au niveau de la TRJ. Ce qui est bénéfique pour le transport des charges et leur recombinaison par effet tunnel [149].

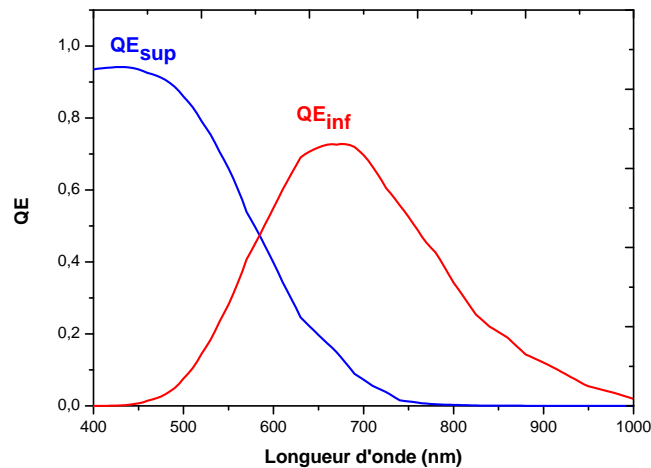


Figure 4.42 – Courbes de rendements quantiques des sous-cellules inférieure et supérieure de la cellule tandem micromorphe, issues de l'analyse des sous-cellules en conditions d'illumination AM1.5G et de court-circuit ($V = 0$ V) à l'aide du wxAMP3.

La Figure 4.43b montre que le champ électrique est très intense à l'interface de la TRJ. Sa valeur peut atteindre une valeur de $1,2 \times 10^6$ V/cm, ce qui est en accord avec la littérature [157]. Ce fort champ permet d'acheminer les porteurs de charge jusqu'aux défauts où ils se recombineront. Il est également presque insensible aux variations de la tension de polarisation, cela montre que la TRJ est bien optimisée. Ces résultats sont en accord avec la littérature [39, 151].

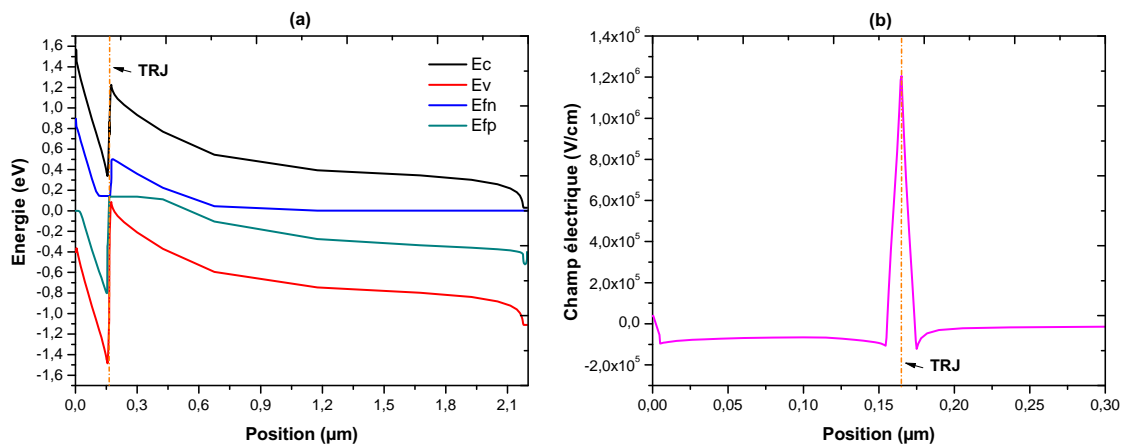


Figure 4.43 – Représentation du diagramme de bandes (a) et du champ électrique (b) de la cellule tandem micromorphe simulée à l'aide du wxAMPS2.

La Figure 4.44 montre les courbes des taux de recombinaison R et de génération G dans la cellule solaire micromorphe. Ces courbes mettent en évidence un fort taux de recombinaison au voisinage de la TRJ principalement vers l'intérieur de la couche p- μ c-Si:H. Ce qui est en accord avec la littérature [151].

Il s'agit d'une recombinaison non localisée qui est une bonne recombinaison entre les électrons et les trous photogénérés. En se recombinant, ces porteurs participent au courant photogénéré.

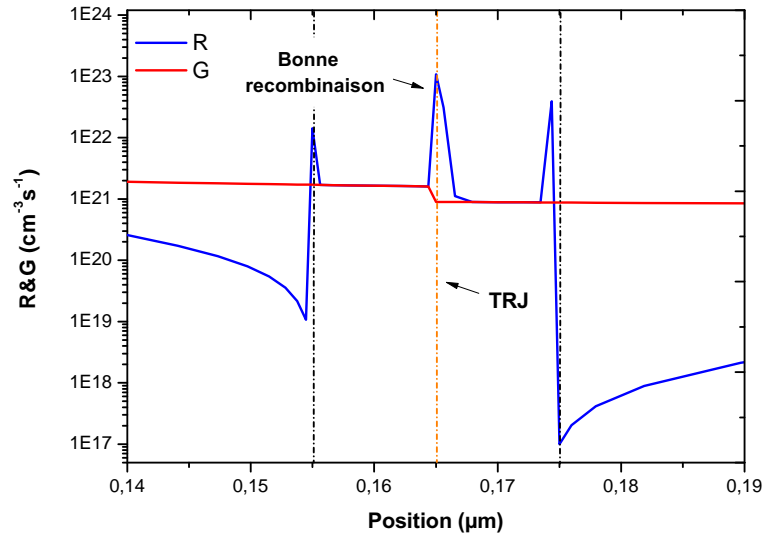


Figure 4.44 – Courbes de taux de recombinaison et de génération de la cellule tandem micromorphe en condition d'illumination AM1.5G simulée à l'aide du wxAMPS2.

En plus d'être meilleures, les performances de la cellule solaire micromorphe sont beaucoup plus stables sous éclairement. En effet, en combinant une sous-cellule à base a-Si:H à faible épaisseur de couche active ($d_{i,sup} = 150$ nm) et une sous-cellule à base de μc -Si:H, il en résulte une structure moins sensible à l'effet SWE.

4.5.4 Simulation et optimisation d'une cellule solaire triple-jonction à l'aide des logiciels wxAMPS

Pour améliorer davantage son rendement, la cellule tandem micromorphe peut être étendue au concept de triple-jonction en intercalant une troisième sous-cellule à base de a-SiGe:H ou de μc -Si:H entre les sous-cellules supérieure et inférieure. Il en résulte les structures triple-jonction suivantes : a-Si:H/a-SiGe:H/ μc -Si:H et a-Si:H/ μc -Si:H/ μc -Si:H [158].

Dans ce qui suit, nous nous proposons de simuler et d'optimiser la triple-jonction a-Si:H/ μc -Si:H/ μc -Si:H dont la structure schématique est illustrée à la Figure 4.45. Il s'agit d'une configuration de type superstrate pin/pin/pin. Le gap de la sous-cellule du milieu à base de μc -Si:H est de 1,42 eV. L'architecture de la triple-jonction est un peu complexe, ce qui rend son optimisation assez délicate.

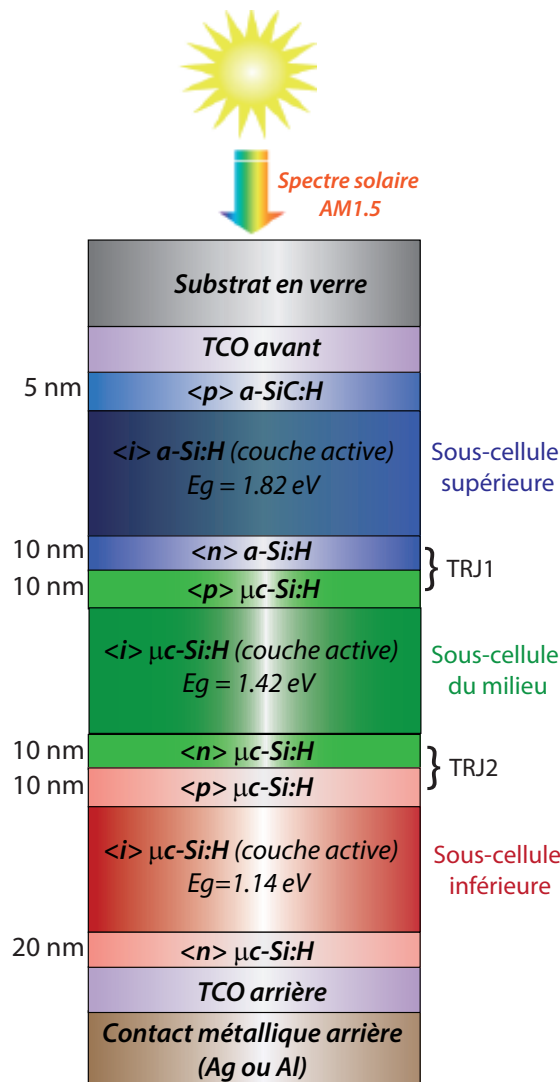


Figure 4.45 – Structure schématique d’une cellule solaire triple-jonction a-Si:H/ μ c-Si:H simulée en conditions d’illumination à l’aide des logiciels wxAMPS.

D’abord, la structure solaire triple-jonction est soumise à l’analyse de sous-cellules sous wxAMPS3. L’épaisseur de la couche active de chaque sous-cellule est ajustée de manière à satisfaire à la condition du current matching. Il en résulte les épaisseurs suivantes : $d_{i,sup} = 73 \text{ nm}$, $d_{i,mil} = 1 \mu\text{m}$ et $d_{i,inf} = 3,16 \mu\text{m}$ des sous-cellules supérieure, du milieu et inférieure, respectivement.

La Figure 4.46a montre la caractéristique $J(V)$ de chaque sous-cellule ainsi que la caractéristique pseudo $J(V)$ de l’ensemble de la structure. A partir de ces caractéristiques, la tension V_{co} de chaque sous-cellule peut être extraite. On a : $V_{co,sup} = 961,5 \text{ mV}$, $V_{co,mil} = 766,1 \text{ mV}$ et $V_{co,inf} = 492 \text{ mV}$.

Une fois que les épaisseurs ont été optimisées, l’étape suivante consiste à simuler la cellule solaire triple-jonction à l’aide du wxAMPS2 en appliquant le modèle TAT. La caractéristique $J(V)$ et les performances photovoltaïques sont reportées à la Figure 4.46b.

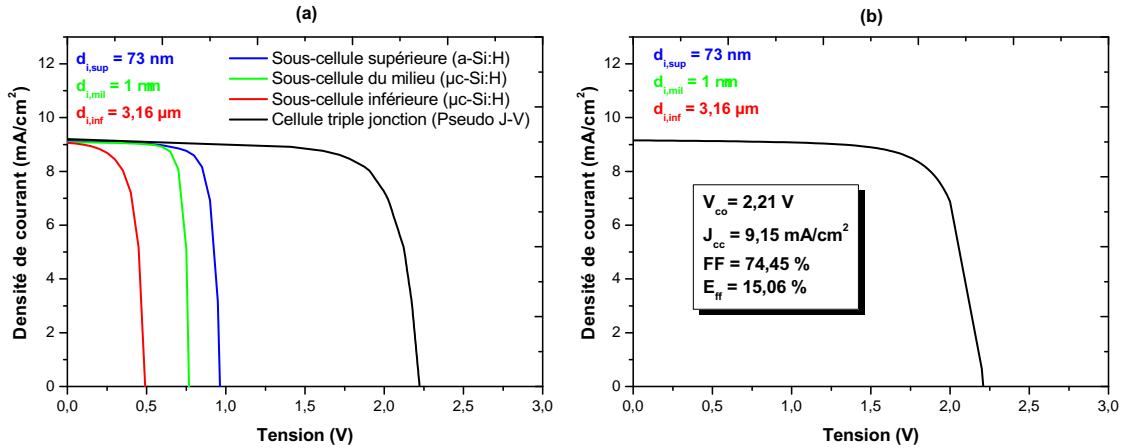


Figure 4.46 – Caractéristiques J(V) de la cellule triple-jonction en condition d’illumination AM1.5G issues : (a) de l’analyse de sous cellules sous wxAMPS3 et (b) de la simulation à l’aide de wxAMPS2.

Le Tableau 4.5 compare les performances de la cellule triple-jonction à celles de la cellule tandem micromorphe.

Cellules	V_{co} (V)	J_{cc} (mA/cm ²)	FF (%)	E_{ff} (%)
Triple-jonction	2,21	9,15	74,45	15,06
Tandem micromorphe	1,36	12,1	71,25	11,73

Tableau 4.5 – Comparaison entre les performances de la cellule tandem micromorphe et de la triple-jonction.

La cellule triple-jonction affiche un rendement de 15,06 % qui est meilleur comparé à celui de la cellule micromorphe. Cela est attribué à une augmentation de la tension V_{co} qui est de 2,21 V. On constate que cette dernière correspond à peu près à la somme des tensions $V_{co,sup}$, $V_{co,mil}$ et $V_{co,inf}$. Cela montre que les TRJ assurent un bon contact ohmique entre les sous-cellules adjacentes.

Quant à la densité de courant J_{cc} , elle est de 9,15 mA/cm² ce qui correspond à une valeur plus faible comparée à celle de la tandem micromorphe. Dans les multi-jonctions, une densité de courant plus faible signifie moins de pertes dans les électrodes, notamment dans les TCO, et une tension V_{co} plus grande représente plus de flexibilité dans la conception de module solaire requérant des tensions élevées.

Le facteur de forme FF de la cellule triple-jonction est de 74,45 %, ce qui représente un bon facteur de forme comparé à celui de la tandem.

D’autre part, on constate que l’épaisseur de la couche active de la sous-cellule amorphe est plus faible dans la triple-jonction qui est de l’ordre de 73 nm. C’est en effet une conséquence de l’empilement de plusieurs jonctions p-i-n [159].

De plus, les sous-cellules du milieu et inférieure sont à base de $\mu\text{c-Si:H}$. Il en résulte une réduction de l'effet SWE et du coup un rendement de conversion photovoltaïque beaucoup plus stable [158]. Un rendement de conversion stabilisé record de 14,04 % avec un minimum de dégradation induite par la lumière de 4 % a été reporté dans la littérature [160].

La Figure 4.47 représente la courbe de rendement quantique de chaque sous-cellule obtenue à partir de l'analyse de sous-cellules à l'aide du wxAMPS3. On voit que la structure triple-jonction permet un meilleur usage du spectre solaire comparé à la cellule tandem micromorphe. En effet, les sous-cellules supérieure, du milieu et inférieure absorbent les longueurs d'ondes courtes (en bleu), moyennes (en vert) et grandes (en rouge), respectivement. Ce qui se traduit par une valeur élevée de la tension V_{co} pour la triple-jonction.

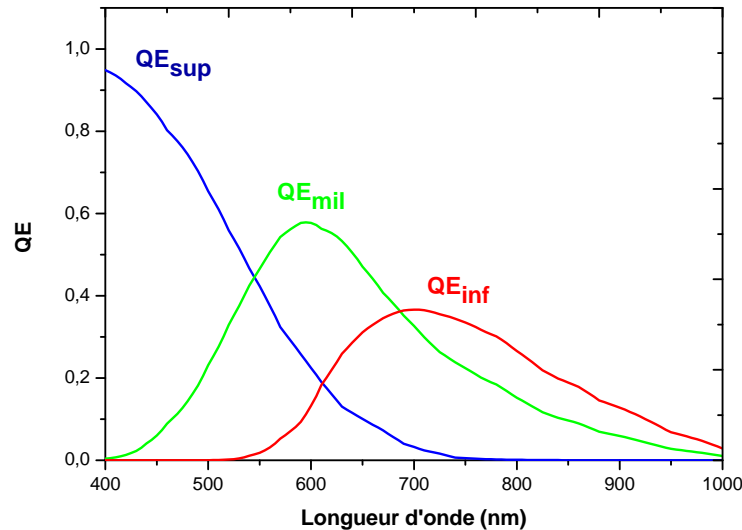


Figure 4.47 – Courbes de rendement quantique des sous-cellules supérieure, du milieu et inférieure, respectivement de la cellule triple-jonction en conditions d'illumination AM1.5G et de court-circuit ($V = 0 \text{ V}$) obtenues à partir de l'analyse de sous-cellules sous wxAMPS3.

La Figure 4.48a donne le diagramme de bande de la cellule solaire triple-jonction simulée sous wxAMPS2. Le rapprochement des pseudos niveaux de Fermi E_{fn} et E_{fp} au niveau des TRJ montre que celles-ci sont bien optimisées. Ce qui est favorable au transport des porteurs photogénérés entre les sous-cellules adjacentes et leur recombinaison par effet tunnel [149]. Le champ électrique au niveau des TRJ est intense comme en témoigne la Figure 4.48b. Il est de $1,35 \times 10^6 \text{ V/cm}$ et de $1,17 \times 10^6 \text{ V/cm}$ au niveau des TRJ1 et TRJ2, respectivement. On constate également par la simulation qu'il reste insensible aux variations de la tension de polarisation. Ce qui est en accord avec la littérature [39, 151, 157].

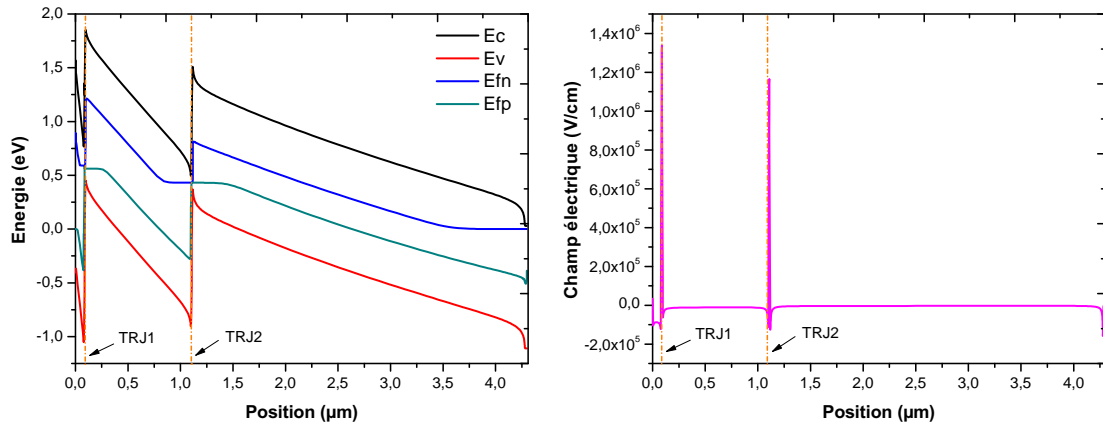


Figure 4.48 – Représentation du diagramme de bandes (a) et du champ électrique (b) de la cellule triple-jonction simulée à l’aide du wxAMPS2.

La Figure 4.49 montre les courbes du taux de recombinaison R et du taux de génération G de la cellule solaire triple-jonction.

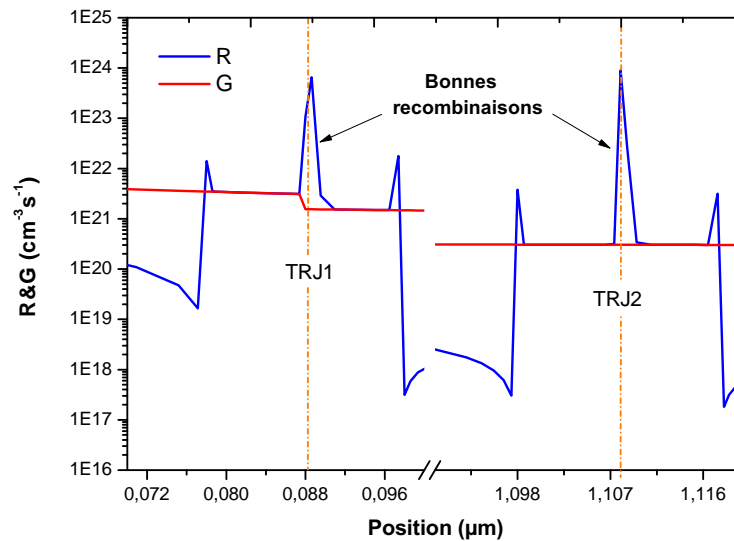


Figure 4.49 – Courbes de taux de génération et de recombinaison en conditions d’illumination AM1.5G de la triple-jonction simulée à l’aide du wxAMPS2.

Comme on peut le voir, on assiste à de forts taux de recombinaison qui ont lieu au voisinage de chaque TRJ et notamment vers l’intérieur des couches p- $\mu\text{-Si:H}$. Il s’agit de bonnes recombinaisons de type non localisées qui contribuent au photocourant de la cellule. Ce qui est en accord avec la littérature [151].

4.6 Conclusion

Dans ce chapitre, l'objectif était d'optimiser les cellules solaires en technologie couche mince de silicium pour l'obtention d'un meilleur rendement de conversion photovoltaïque selon l'approche V_{co} . Il s'agit d'optimiser les paramètres physiques de matériaux et la structure de la cellule solaire de manière à améliorer la tension V_{co} et du coup le rendement de conversion. Cette optimisation s'est faite au moyen de la simulation en utilisant dans un premier temps le logiciel AMPS-1D puis les logiciels wxAMPS2 et wxAMPS3.

Nous avons d'abord abordé quelques concepts de modélisation numérique puis nous avons donné une description des logiciels de simulation. Ensuite, nous avons entamé notre travail de simulation. En premier lieu, nous avons optimisé les cellules solaires p-i-n à simple jonction : l'une à base de a-Si:H et l'autre à base de μ c-Si:H à l'aide de l'AMPS-1D. L'optimisation de ces cellules a consisté à :

- Réduire les pertes électriques en dopant fortement les couches n et p.
- Réduire les pertes optiques en réduisant suffisamment l'épaisseur des couches dopées. Pour la cellule amorphe, la couche p doit en outre posséder un large gap pour favoriser la transmission du rayonnement solaire vers la couche active. Cette couche appelée couche fenêtre est à base de a-SiC:H.
- Optimiser le gap de mobilité de la couche active de la cellule amorphe.
- Optimiser l'interface p-i de la cellule amorphe en insérant une couche buffer à l'interface p-i. Il en résulte une réduction du taux de recombinaison et du coup une amélioration de la tension V_{co} .
- Optimiser l'épaisseur de la couche active pour un rendement maximal. Pour la cellule amorphe, il faut en outre que cette épaisseur soit inférieure à 200 nm pour que le rendement soit plus stable. Quant à la cellule microcristalline, il est nécessaire que la couche active soit plus épaisse en raison du faible coefficient du μ c-Si:H. Toutefois, son rendement reste stable puisque le μ c-Si:H est insensible à l'effet SWE.

Les simulations ont montré également que la p-i-n amorphe absorbe les courtes longueurs d'onde du visible alors que la p-i-n microcristalline absorbe un plus large spectre qui s'étend jusqu'aux grandes longueurs d'onde du rouge et du proche infrarouge.

Toutefois, le rendement d'une cellule solaire p-i-n amorphe reste limité. Quant à la cellule p-i-n microcristalline, elle ne présente pas vraiment un intérêt économique en raison des couches actives trop épaisses mais, elle constitue en revanche un très bon candidat en guise de cellules inférieures pour les structures à multijonction.

Nous avons montré par la simulation que ces structures permettent d'obtenir des rendements plus élevés comparés aux structures à simple jonction.

Nous avons d'abord simulé et optimisé une structure tandem micromorphe a-Si:H/ μ c-Si:H à l'aide de l'AMPS-1D. Les sous-cellules adjacentes de la cellule solaire sont interconnectées via une TRJ artificielle que nous avons optimisée pour que celle-ci assure un bon contact ohmique avec le minimum de pertes électriques et optiques. Une TRJ de bonne qualité est cruciale pour l'obtention d'un rendement de conversion élevé. L'épaisseur des couches actives a été optimisée de façon à satisfaire à la condition du current matching. Avec l'AMPS-1D, cela a consisté à trouver un rendement de conversion maximal de la cellule solaire. La simulation a montré une tension V_{co} élevée comparée à celle de la cellule à simple jonction à base de a-Si:H et un meilleur rendement de conversion. Ces résultats ont été attribués à une meilleure exploitation du spectre solaire puisqu'en effet la courbe de rendement quantique montre une absorption qui se fait dans le visible et s'étend jusqu'aux rouges et proche infra-rouge.

Puis, nous avons repris la simulation de la tandem micromorphe en utilisant les logiciels wxAMPS2 et wxAMPS3. Ces derniers sont plus adaptés à la simulation des structures à multijonction. D'ailleurs, il n'était plus nécessaire d'insérer une TRJ artificielle entre les sous-cellules puisque le wxAMPS2 intègre le modèle d'effet tunnel TAT. Dans un premier temps, la structure est soumise à l'analyse de sous-cellules à l'aide du wxAMPS3. Cette analyse fournit les courbes $J(V)$ des sous-cellules et une pseudo- $J(V)$ de la tandem que nous avons utilisées pour réajuster l'épaisseur des couches actives en vue de l'obtention de la condition du current matching. Ensuite, nous avons simulé la tandem avec le logiciel wxAMPS2 en appliquant le modèle TAT. On constate alors que la tension V_{co} est presque égale à la somme des tensions V_{co} des sous-cellules extraites à partir des courbes $J(V)$ de l'analyse sous-cellules. Ce qui montre que la TRJ de la structure a bien été optimisée pour assurer un bon contact ohmique. L'analyse de sous-cellules fournit également les courbes de rendement quantique de chaque sous-cellule qui montrent que la sous-cellule supérieure absorbe les courtes longueurs d'onde du visible alors que la sous-cellule inférieure absorbe les longueurs d'ondes du rouge et du proche infra-rouge.

Nous avons ensuite intercalé une troisième sous-cellule à base de μ c-Si:H entre les sous-cellules adjacentes la tandem micromorphe. Il en résulte une triple-jonction a-Si:H/ μ c-Si:H/ μ c-Si:H que nous avons simulé et optimisée à l'aide des logiciels wxAMPS. Les résultats de simulation ont montré que le rendement de conversion est plus meilleur comparé à celui de la tandem micromorphe. Cela est attribuée à une tension V_{co} plus élevée dont la valeur est presque égale à la somme des tensions V_{co}

de chaque sous-cellule cellule de la triple-jonction. Les TRJ sont donc bien optimisées et du coup assurent un bon contact ohmique entre les sous-cellules adjacentes. Les courbes du rendement quantique montrent que les sous-cellules supérieure, du milieu et inférieure absorbent les longueurs d'ondes courtes, moyennes et grandes du spectre solaire. Par conséquent, la triple-jonction est une structure qui permet une meilleure exploitation du spectre solaire comparée à la cellule tandem micromorphe, ce qui explique le fait que la tension V_{co} soit plus élevée.

Les paramètres photovoltaïques des cellules solaires à simple jonction, tandem micromorphe et triple jonction sont résumés au Tableau 4.6.

Cellule	V_{co} (V)	J_{cc} (mA/cm ²)	FF (%)	E_{ff} (%)
Simple jonction à base de a-Si:H ¹	0,924	13,7	70	8,9
Simple jonction à base de μ c-Si:H ¹	0,462	21,2	68,9	6,75
Tandem micromorphe ¹	1,34	11,42	68,7	10,49
Tandem micromorphe ²	1,36	12,1	71,25	11,73
Triple-jonction ²	2,21	9,15	74,45	15,06

simulées avec : ¹ le logiciel AMPS-1D ² les logiciels wxAMPS.

Tableau 4.6 – Performances des cellules solaires à simple jonction en a-Si:H, à simple jonction en μ c-Si:H, tandem micromorphe a-Si:H/ μ c-Si:H et triple-jonction a-Si:H/ μ c-Si:H/ μ c-Si:H à configuration superstrat.

Par ailleurs, les structures tandem micromorphe et triple-jonction sont moins sensibles à l'effet SWE puisque l'épaisseur de la couche active des sous-cellules supérieure à base de de a-Si:H sont plus réduites. Il en résulte ainsi des rendements de conversion beaucoup plus stables.

Conclusion générale

Ce travail de thèse a porté sur les cellules solaires en technologie couche minces à base de silicium amorphe hydrogéné a-Si:H qui font partie de la deuxième génération des cellules solaires. L'objectif de ce travail est d'optimiser les cellules solaires à base de a-Si:H pour l'obtention de meilleures performances photovoltaïques. L'optimisation s'est faite selon l'approche V_{co} à l'aide des logiciels de simulation AMPS-1D, wxAMPS2 et wxAMPS3.

Dans un premier chapitre, nous avons jugé utile de rappeler les bases de la conversion photovoltaïque.

Le deuxième chapitre a été consacré à l'étude détaillée des propriétés du matériau de a-Si:H. Nous avons vu que celui-ci possède une structure désordonnée qui se traduit par une densité d'états localisée (DOS) dans la bande interdite du matériau à savoir les queues de bandes modélisées par deux exponentielles décroissantes, les liaisons pendantes modélisées par deux gaussiennes et les états pièges discrets dus aux impuretés. Cette densité de défauts peut être réduite d'une manière significative grâce à la passivation des liaisons pendantes à l'hydrogène. Elle est de l'ordre de 10^{15} cm^{-3} pour du a-Si:H de qualité solaire. Le a-Si:H est sujet au phénomène de dégradation induite par la lumière ou l'effet Staëbler-Wronski (SWE). Ce phénomène se manifeste par une augmentation de la densité de liaisons pendantes dans la cellule solaire sous illumination, ce qui entraîne une diminution du rendement de conversion photovoltaïque. Ce rendement atteint une valeur stable après 1000 heures d'exposition au rayonnement solaire. On parlera ainsi de rendement initial ou stabilisé selon qu'il s'agisse du rendement avant ou après illumination. Le a-Si:H est un semiconducteur à un gap direct. Il a lieu de distinguer entre son gap de mobilité et son gap optique. La valeur du gap optique est légèrement plus faible que celle du gap de mobilité et se situe entre 1,7 et 1,8 eV. Il possède un fort coefficient d'absorption dans la partie visible du spectre solaire, ce qui permet de réaliser des cellules solaires en technologie couches minces. Les principaux dopants du a-Si:H sont le phosphore pour un dopage de type n et le bore pour un dopage de type p. Le mécanisme de dopage a-Si:H est différent de celui du c-Si. Il a été expliqué par le modèle d'autocompensation de Street. Toutefois, le dopage du a-Si:H est moins

efficace comparé au c-Si et par conséquent les conductivités sont plus faibles. En outre, il se traduit par une augmentation de la densité des défauts dans le a-Si:H. Il en résulte des longueurs de diffusion des porteurs beaucoup plus faibles.

Le silicium microcristallin hydrogéné $\mu\text{c-Si:H}$ est une forme cristalline du a-Si:H. Il s'agit d'un matériau biphasé composé de microcristaux noyés dans une phase amorphe. Son réseau est caractérisé par un ordre à grande distance et la densité des défauts est plus faible comparée à celle du a-Si:H. Le dopage du $\mu\text{c-Si:H}$ est plus facile et n'affecte pas la densité des défauts. Toutefois, la longueur de diffusion des porteurs reste faible. Il possède un gap indirect dont la valeur est de l'ordre de 1,1 eV. Son spectre d'absorption est plus large comparé au a-Si:H notamment avec une bonne absorption des longueurs d'onde dans le rouge et le proche infrarouge. Cependant son coefficient d'absorption est faible si bien que les couches intrinsèques doivent être plus épaisses entre 1 à 4 μm . Le $\mu\text{c-Si:H}$ a l'avantage de ne pas être sensible à l'effet SWE.

Dans le troisième chapitre, nous avons étudié l'architecture des cellules solaires en couches minces de silicium puis nous avons vu quelques techniques de dépôts de couches minces de matériau. Les couches de a-Si:H ou de $\mu\text{c-Si:H}$ peuvent croître sur une large variété de substrat (verre, plastique ou métal) en raison des faibles températures de dépôts. L'architecture des cellules solaires en couches minces de silicium repose sur deux configurations à savoir la configuration superstrat (ou p-i-n) et la configuration substrat (ou n-i-p). Il s'agit de dispositifs de dérivation par opposition aux dispositifs de diffusion que sont les cellules PN. La cellule p-i-n est déposée sur un substrat transparent. Celui-ci est recouvert d'une couche de TCO pour former le contact avant de la cellule. La cellule n-i-p quant à elle est déposée sur un substrat opaque. Celui-ci constitue le contact arrière de la cellule. Les couches dopées n et p servent à établir le champ électrique à travers la couche active « i » où a lieu principalement la photogénération des paires électron-trou. Sous l'action du champ électrique, les porteurs électrons et trous sont séparés puis entraînés jusqu'aux couches n et p, respectivement, où ils seront collectés par les électrodes de la cellule. Quelque soit la configuration, la lumière pénètre toujours par la face avant p et pour cause : minimiser le trajet des trous jusqu'à l'électrode dont la mobilité est plus faible comparée à celle des électrons. Les électrodes des cellules solaires sont à base de matériaux TCO caractérisés une bonne transparence et une conductivité satisfaisante. Ce sont des semiconducteurs dégénérés de type n à gap élevé de l'ordre de 3 à 4 eV. Les TCO rugueux sont utilisés pour réaliser des cellules solaires texturées. Les couches de a-Si:H et de $\mu\text{c-Si:H}$ peuvent être déposées grâce aux techniques PECVD, VHF-PECVD et HWCVD. Ces techniques consistent en la dissociation du gaz silane SiH_4 dilué dans l'hydrogène H_2 grâce à

un plasma ou un filament chaud. Les couches dopées n et p sont obtenues à partir de l'adjonction de gaz de phosphine (PH_3) et de diborane (B_2H_6) respectivement au mélange gazeux SiH_4 et de H_2 . L'obtention de couches fenêtres à base de p-a-SiC:H se fait en injectant du gaz méthane (CH_4). Quant aux couches de TCO, elles peuvent être obtenues par les techniques PVD assistées par plasma comme la technique de pulvérisation magnétron radiofréquence. Toutes ces techniques de dépôts opèrent à basse température ($<400^\circ\text{C}$) et sont donc à faible budget thermique. Ainsi, il est possible d'utiliser n'importe quel type de substrat à bas coût (verre, métal, plastique) sans risque de dégradation. Ces techniques permettent en plus de réaliser des couches de matériaux en grande surface.

Dans le quatrième chapitre, nous avons procédé à la simulation et l'optimisation des cellules solaires en couches minces de silicium pour l'obtention de meilleurs rendements de conversion photovoltaïque selon l'approche V_{co} . Nous avons commencé par simuler et optimiser des cellules solaires p-i-n à simple jonction à l'aide de l'AMPS-1D, l'une à base de a-Si:H et l'autre à base de $\mu\text{c-Si:H}$. Le meilleur rendement de conversion de la p-i-n amorphe est de 8,9 % pour une tension V_{co} de 924 mV à une épaisseur optimale de la couche active $d_i=200$ nm. Cette dernière représente une épaisseur convenable puisqu'elle permet à la cellule solaire d'être moins sensible à l'effet SWE. Le spectre d'absorption de la cellule se situe dans le spectre du visible entre 350 et 700 nm. Quant à la p-i-n microcristalline, son rendement maximal est de 6,75 % pour une tension V_{co} de 462 mV à une épaisseur optimale de la couche active $d_i=1,5$ μm . Son spectre d'absorption est plus large comparé à celui de la p-i-n amorphe puisqu'il s'étend jusqu'aux régions du rouge et de l'infrarouge comprises entre 600 et 1000 nm. Ces premiers résultats de simulation ont montré que la p-i-n amorphe est à faible rendement. Quant à la cellule p-i-n microcristalline, elle ne présente pas d'intérêt économique en raison des couches actives trop épaisses. En revanche, elle est utilisée avantageusement dans les structures à multijonction comme cellules inférieures. Ces structures ont fait l'objet de la deuxième partie des simulations. Elles permettent d'obtenir des rendements de conversion beaucoup plus élevés comparés aux cellules à simple jonction p-i-n et cela grâce à l'amélioration de la tension de circuit ouvert V_{co} . Nous avons d'abord simulé et optimisé une cellule solaire tandem micromorphe qui consiste en une sous-cellule supérieure à base de a-Si:H combinée à une sous-cellule inférieure à base de $\mu\text{c-Si:H}$. En utilisant l'AMPS-1D, il est nécessaire d'implémenter une TRJ artificielle entre les sous-cellules. Celle-ci consiste en deux couches à base de $\mu\text{c-Si:H}$ fortement dopées, de faibles épaisseurs et intégrant une forte densité de défauts. Les résultats de simulation ont montré un rendement de 10,49 % pour une tension V_{co} de 1,34 V. Puis nous avons repris la simulation et l'optimisation de la structure tandem micromorphe à l'aide des logiciels wxAMPS2 et wxAMPS3. Ces derniers représentent les versions révisées du

logiciel AMPS-1D qui sont beaucoup plus adaptées à la simulation des structures à multijonction. Le wxAMPS2 permet de s'affranchir de la TRJ artificielle puisqu'il intègre les modèles pour l'effet tunnel. Les résultats de simulation donnent un rendement de 11,73 % pour une tension V_{co} de 1,36 V. Le rendement quantique de la cellule tandem micromorphe a montré une meilleure exploitation de spectre solaire, ce qui explique l'obtention d'une tension V_{co} plus grande. Cette dernière est presque égale à la somme des tensions des sous-cellules. Ce qui a permis d'affirmer que la TRJ assure un bon contact ohmique et cela grâce à une bonne optimisation de ses paramètres. En intercalant une sous-cellule à base de $\mu\text{-Si:H}$ avec un gap de 1,42 eV entre les sous-cellules de la tandem micromorphe, on réalise un triple-jonction que nous avons simulée et optimisée à l'aide des logiciels wxAMPS2 et wxAMPS3. Les résultats de simulation montre un rendement élevé de 15,06 % pour une tension V_{co} de 2,21 V. Ces performances sont beaucoup plus élevées comparées à celles de cellule solaire tandem micromorphe. Le rendement quantique de la cellule triple-jonction absorbe les courtes, moyennes et grandes longueurs d'onde et par conséquent on a une meilleure exploitation du spectre solaire, ce qui explique la valeur élevée de la tension V_{co} . Les structures tandem micromorphe et triple-jonction sont des structures moins sensibles à l'effet SWE puisque l'épaisseur des couches actives des sous-cellules supérieures à base de a-Si:H sont plus faibles et les sous-cellules inférieures sont à base de $\mu\text{-Si:H}$.

Perspectives

Ce travail de recherche peut être complété en envisageant par exemple d'améliorer les performances des structures à multijonction selon l'approche J_{cc} . Il s'agit pour cela d'utiliser les techniques de piégeage de la lumière comme la texturation des interfaces dans les cellules solaires à couches minces. Cela permet d'accroître l'absorption de la lumière et il en résulte des valeurs élevées de J_{cc} et du coup l'amélioration des rendements de conversion photovoltaïque. Il faut également disposer de logiciels adaptés à ce type de simulation.

Références bibliographiques

- [1] Les enjeux autour de l'épuisement des ressources fossiles | L'énergie en questions. <https://www.lenergieenquestions.fr/les-enjeux-autour-de-lepuisement-des-ressources-fossiles/>.
- [2] gbogaert. Le stock des combustibles fossiles s'épuise | Quelle énergie durable pour demain? <http://energiepourdemain.fr/le-stock-des-combustibles-fossiles-sepuise/>.
- [3] GIL. Géopolitique des énergies fossiles. <http://www.leconflit.com/article-geopolitique-des-energies-fossiles-118938490.html>.
- [4] Les énergies alternatives. <http://www.energiealternative.fr/>.
- [5] Current PV Technology. http://www.fsec.ucf.edu/en/consumer/solar_electricity/basics/current_technology.htm.
- [6] Farid Bensebaa. *Nanoparticle Technologies : From Lab to Market*. Academic Press, 2012.
- [7] Yoshihiro Hamakawa. *Thin-Film Solar Cells : Next Generation Photovoltaics and Its Applications*. Springer Science & Business Media, 2003.
- [8] Taesoo D. Lee and Abasifreke U. Ebong. A review of thin film solar cell technologies and challenges. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 70 :1286–1297, 2017.
- [9] Miroslav Zeman. Thin-film silicon PV technology. *Journal of Electrical Engineering*, 61(5) :271–276, 2010.
- [10] D. E. Carlson and C. R. Wronski. Amorphous silicon solar cell. *Applied Physics Letters*, 28(11) :671–673, 1976.
- [11] V. Petrova-Koch. *High-Efficient Low-Cost Photovoltaics : Recent Developments*. Springer Science & Business Media, 2008.
- [12] K. Mertens. *Photovoltaics : Fundamentals, Technology and Practice*. John Wiley & Sons, 2014.

- [13] P. Wolfe. *Solar Photovoltaic Projects in the Mainstream Power Market*. Routledge, 2013.
- [14] H. Procaccia. *L'énergie nucléaire, les énergies fissiles et renouvelables*. Connaissances et Savoirs, 2014.
- [15] T. Pavlovic, D. Milosavljevic, I. Radonjic, L. Pantic, and A. Radivojevic. Application of solar cells made of different materials in 1 MW PV solar plants in Banja Luka. *Contemporary Materials*, 2(2) :155–163, 2011.
- [16] NREL : National Center for photovoltaics Home Page. [en ligne]. <http://www.nrel.gov/ncpv/> (page consultée le 06/11/2015).
- [17] I. M. Dharmadasa. *Advances in Thin-Film Solar Cells*. CRC Press, 2012.
- [18] F. Lévy. *Physique et technologie des semiconducteurs*. PPUR presses polytechniques, 1995.
- [19] W. E. Spear and P. G. Le Comber. Substitutional doping of amorphous silicon. *Solid State Communications*, 17(9) :1193–1196, 1975.
- [20] Léo Peres. *Cristaux photoniques bidimensionnels pour l'absorption de la lumière dans les cellules solaires organiques*. PhD thesis, Bordeaux, 2014.
- [21] A. Luque and S. Hegedus, editors. *Handbook of photovoltaic science and engineering*. Wiley, Chichester, West Sussex, U.K, 2nd ed edition, 2011.
- [22] C Hu and R.M. White. *Solar Cells : From Basic to Advanced Systems*. McGraw-Hill, New York, 1983.
- [23] Stéphan ASTIER. Conversion photovoltaïque : du rayonnement solaire à la cellule. *Techniques de l'ingénieur Composants optoélectroniques*, 2017.
- [24] Alain Ricaud. *Photopiles solaires : de la physique de la conversion photovoltaïque aux filières, matériaux et procédés*. Presses polytechniques et universitaires romandes, 1997.
- [25] Edmond Becquerel. Mémoire sur les effets électriques produits sous l'influence des rayons solaires. *Comptes rendus de l'Académie des sciences*, IX, 1839.
- [26] Claude Aslangul. *Mécanique quantique : Fondements et premières applications*. De Boeck Supérieur, 2016.
- [27] Sheng S. Li. *Semiconductor Physical Electronics*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [28] B. Sapoval, C. Hermann, and C. Hermann. *Physics of Semiconductors*. Springer Science & Business Media, 2003.
- [29] T. Schutz-Kuchly. *Investigation du silicium de qualité solaire de type n pour la fabrication de cellules photovoltaïques*. PhD thesis, Aix-Marseille Université, 2011.

- [30] M. J. Kerr and others. *Surface, emitter and bulk recombination in silicon and development of silicon nitride passivated solar cells*. PhD thesis, Université d'Australie, 2002.
- [31] A. Hangleiter and R. Häcker. Enhancement of band-to-band Auger recombination by electron-hole correlations. *Physical Review Letters*, 65(2) :215, 1990.
- [32] W. Shockley and W. T. Read Jr. Statistics of the recombinations of holes and electrons. *Physical review*, 87(5) :835, 1952.
- [33] R. Maciejko. *Optoélectronique*. Presses inter Polytechnique, 2002.
- [34] M. A. Green and University of New South Wales. Centre for Photovoltaic Devices and Systems. *Silicon solar cells : advanced principles & practice / Martin A. Green*. Centre for Photovoltaic Devices and Systems, University of New South Wales, Kensington, N.S.W, 1995.
- [35] J.F. Joly. *Etude sur la cinétique des défauts structuraux dans le silicium amorphe*. PhD thesis, Université de Montréal, 2013.
- [36] N. F. Mott and E. A. Davis. *Electronic processes in non-crystalline materials*. International series of monographs on physics. Clarendon Press ; Oxford University Press, Oxford : New York, 2d ed edition, 1979.
- [37] R. C. Chittick, J. H. Alexander, and H. F. Sterling. The Preparation and Properties of Amorphous Silicon. *Journal of The Electrochemical Society*, 116(1) :77–81, 1969.
- [38] C. Miazza and A. Shah. *Développement de photodétecteurs monolithiques par intégration verticale de couches de silicium amorphe hydrogéné*. Ph.D. thesis, Université de Neuchâtel, 2005.
- [39] J. Poortmans and V. Arkhipov. *Thin Film Solar Cells : Fabrication, Characterization and Applications*. John Wiley & Sons, 2006.
- [40] R. Lachaume. *Contribution à la caractérisation électrique et à la simulation numérique des cellules photovoltaïques silicium à hétérojonction*. Thèse de doctorat, Université de Grenoble, France, 2014.
- [41] M. Stutzmann and D. K. Biegelsen. Microscopic nature of coordination defects in amorphous silicon. *Physical Review B*, 40(14) :9834–9840, 1989.
- [42] G. Pfanner, C. Freysoldt, J. Neugebauer, F. Inam, D. Drabold, K. Jarolimek, and M. Zeman. Dangling-bond defect in a-Si:H : Characterization of network and strain effects by first-principles calculation of the EPR parameters. *Physical Review B*, 87(12) :125308, 2013.
- [43] Simon M. Sze and Kwok K. Ng. *Physics of Semiconductor Devices*. John Wiley & Sons, 2006.

- [44] D. Weaire. Existence of a Gap in the Electronic Density of States of a Tetrahedrally Bonded Solid of Arbitrary Structure. *Physical Review Letters*, 26(25) :1541–1543, June 1971.
- [45] P. W. Anderson. Random-Phase Approximation in the Theory of Superconductivity. *Physical Review*, 112(6) :1900–1916, 1958.
- [46] K. Iniewski. *Semiconductor Radiation Detection Systems*. CRC Press, 2010.
- [47] A. Solhi, M. Sahnoune, H. Lhermite, and O. Bonnaud. Numerical simulation and experimental verification of the parameters determining the base current in an a-Si:H/c-Si emitter-base heterojunction bipolar transistor. *Solid State Electronics*, 35 :1609–1620, 1992.
- [48] A. Shah. *Thin-Film Silicon Solar Cells*. EPFL Press, 2010.
- [49] G. W Taylor and J. G Simmons. Basic equations for statistics, recombination processes, and photoconductivity in amorphous insulators and semiconductors. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 8 :940–946, 1972.
- [50] J. L. Gray. A computer model for the simulation of thin-film silicon-hydrogen alloy solar cells. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 36(5) :906–912, 1989.
- [51] Chih-Tang Sah and W. Shockley. Electron-Hole Recombination Statistics in Semiconductors through Flaws with Many Charge Conditions. *Physical Review*, 109 :1103–1115, 1958.
- [52] Chih-Tang Sah. The equivalent circuit model in solid-state electronics ; Part II : The multiple energy level impurity centers. *Proceedings of the IEEE*, 55(5) :672–684, 1967.
- [53] M. F. Thorpe and M. I. Mitkova. *Amorphous Insulators and Semiconductors*. Springer Science & Business Media, 1997.
- [54] C. R. Wronski, J. M. Pearce, R. J. Koval, A. S. Ferlauto, and R. W. Collins. Progress in amorphous silicon based solar cell technology. *RIO*, 2 :6–11, 2002.
- [55] Yue Kuo. *Thin film transistors. 1. Amorphous silicon thin film transistors*. Springer Science & Business Media, 2004.
- [56] R. A. Street. *Hydrogenated Amorphous Silicon*. Cambridge University Press, 2005.
- [57] A. H. Mahan, L. M. Gedvilas, and J. D. Webb. Si–H bonding in low hydrogen content amorphous silicon films as probed by infrared spectroscopy and x-ray diffraction. *Journal of Applied Physics*, 87(4) :1650–1658, 2000.
- [58] S. Martín de Nicolás, D. Muñoz, A. S. Ozanne, N. Nguyen, and P. J. Ribeyron. Optimisation of doped amorphous silicon layers applied to heterojunction solar cells. *Energy Procedia*, 8 :226–231, 2011.

- [59] D. L. Staebler and C. R. Wronski. Reversible conductivity changes in discharge-produced amorphous Si. *Applied Physics Letters*, 31(4) :292–294, 1977.
- [60] O. Tosoni. *Conception, élaboration et intégration d'électrodes transparentes optimisées pour l'extraction des charges dans des dispositifs photovoltaïques*. PhD thesis, Université de Grenoble, 2013.
- [61] J. Damon-Lacoste. *Vers une ingénierie de bandes des cellules solaires à hétérojonctions a-Si:H/c-Si. Rôle prépondérant de l'hydrogène*. phdthesis, Ecole Polytechnique, 2007.
- [62] P. Pernet. *Développement de cellules solaires en silicium amorphe de type n-i-p sur substrats souples*. Ph.D. thesis, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Lausanne, 2000.
- [63] Sukti Hazra, A. R. Middy, Swati Ray, C. Malten, and F. Finger. Role of deposition parameters on the photovoltaic quality of amorphous silicon germanium alloys : correlation of microstructure with defect density and electronic transport. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 34(16) :2475, 2001.
- [64] S. M. Iftiqar, Jeong Chul Lee, Jieun Lee, Juyeon Jang, Yeun-Jung Lee, and Junsin Yi. Single- and Multiple-Junction p-i-n Type Amorphous Silicon Solar Cells with p-a-Si_{1-x}C_x:H and nc-Si:H Films. 2012.
- [65] R. V. D'Aiello, P. H. Robinson, and H. Kressel. Epitaxial silicon solar cells. *Applied Physics Letters*, 28(4) :231–234, 1976.
- [66] S. Vepřek and V. Mareček. The preparation of thin layers of Ge and Si by chemical hydrogen plasma transport. *Solid-State Electronics*, 11(7) :683–684, 1968.
- [67] S. Usui and M. Kikuchi. Properties of heavily doped GD-Si with low resistivity. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 34(1) :1–11, 1979.
- [68] J. Meier, S. Dubail, R. Platz, P. Torres, U. Kroll, J.A. Anna Selvan, N. Pella-ton Vaucher, Ch. Hof, D. Fischer, H. Keppner, R. Flückiger, A. Shah, V. Shklover, and K.-D. Ufert. Towards high-efficiency thin-film silicon solar cells with the “micromorph” concept. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 49(1–4) :35–44, 1997.
- [69] C. Droz. *Thin film microcrystalline silicon layers and solar cells microstructure and electrical performances*. Ph.D. thesis, Université de Neuchâtel, 2003.
- [70] R. W. Collins, A. S. Ferlauto, G. M. Ferreira, Chi Chen, Joohyun Koh, R. J. Koval, Yeeheng Lee, J. M. Pearce, and C. R. Wronski. Evolution of microstructure and phase in amorphous, protocrystalline, and microcrystalline

- silicon studied by real time spectroscopic ellipsometry. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 78(1–4) :143–180, 2003.
- [71] T. Söderström. *Single and multi-junction thin film silicon solar cells for flexible photovoltaics*. Ph.D. thesis, Université de Neuchâtel, 2009.
- [72] S. Hamma and P. Roca i Cabarrocas. Low temperature growth of highly crystallized silicon thin films using hydrogen and argon dilution. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 227–230, Part 2 :852–856, 1998.
- [73] Jin Jang, Sung Ok Koh, Tae Gon Kim, and Sung Chul Kim. Mechanism of the growth of microcrystalline silicon. *Applied Physics Letters*, 60(23) :2874–2876, 1992.
- [74] N. Beck, J. Meier, J. Fric, Z. Remeš, A. Poruba, R. Flückiger, J. Pohl, A. Shah, and M. Vaněček. Enhanced optical absorption in microcrystalline silicon. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 198–200, Part 2 :903–906, 1996.
- [75] J. Meier, S. Dubail, R. Fluckiger, D. Fischer, H. Keppner, and A. Shah. Intrinsic microcrystalline silicon ($\mu\text{c-Si:H}$)-a promising new thin film solar cell material. volume 1, pages 409–412. IEEE, 1994.
- [76] A. Shah, J. Meier, E. Vallat-Sauvain, C. Droz, U. Kroll, N. Wyrsh, J. Guillet, and U. Graf. Microcrystalline silicon and ‘micromorph’ tandem solar cells. *Thin Solid Films*, 403 :179–187, 2002.
- [77] P. St’ahel, S. Hamma, P. Sládek, and P. Roca i Cabarrocas. Metastability studies in silicon thin films : from short range ordered to medium and long range ordered materials. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 227–230, Part 1 :276–280, 1998.
- [78] A. V. Shah, J. Meier, E. Vallat-Sauvain, N. Wyrsh, U. Kroll, C. Droz, and U. Graf. Material and solar cell research in microcrystalline silicon. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 78(1) :469–491, 2003.
- [79] H. Keppner, J. Meier, P. Torres, D. Fischer, and A. Shah. Microcrystalline silicon and micromorph tandem solar cells. *Applied Physics A : Materials Science and Processing*, 69(2) :169–177, 1999.
- [80] A. Banerjee and S. Guha. Study of back reflectors for amorphous silicon alloy solar cell application. *Journal of Applied Physics*, 69(2) :1030–1035, 1991.
- [81] Chetan Singh Solanki. *Solar Photovoltaics : Fundamentals, Technologies And Applications*. PHI Learning Pvt. Ltd., 2015.
- [82] Y. Tawada, M. Kondo, H. Okamoto, Y. Hamakawa, and K. Tsuge. Properties and structure of a-SiC:H for high-efficiency a-Si solar cell. *Journal of Applied Physics*, 53 :5273–5281, 1982.

- [83] N. Andoh, H. Nagayoshi, T. Kanbashi, and K. Kamisako. Characterization of high-quality a-SiC:H films prepared by hydrogen-radical CVD method. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 49(1) :89–94, 1997.
- [84] Y.t. Kim, B. Hong, G.e. Jang, S.j. Suh, and D.h. Yoon. Characterization of a-SiC:H Films Deposited by RF Plasma CVD. *Crystal Research and Technology*, 37(2-3) :219–224, 2002.
- [85] J. Fölsch, H. Rübél, and H. Schade. Change in bonding properties of amorphous hydrogenated silicon-carbide layers prepared with different gases as carbon sources. *Applied Physics Letters*, 61(25) :3029–3031, 1992.
- [86] B. Rech, C. Beneking, and H. Wagner. Improvement in stabilized efficiency of a-Si:H solar cells through optimized p/i-interface layers. *Solar energy materials and solar cells*, 41 :475–483, 1996.
- [87] D.J. Lee. The Characteristics of a Hydrogenated Amorphous Silicon Semi-transparent Solar Cell When Applying n/i Buffer Layers. *ETRI Journal*, 35(4) :730–733, 2013.
- [88] N. Palit and P. Chatterjee. Computer analysis of a-Si:H p-i-n solar cells with a hydrogenated microcrystalline silicon p layer. *Journal of Applied Physics*, 86(12) :6879–6889, 1999.
- [89] K. L. Chopra, S. Major, and D. K. Pandya. Transparent conductors—A status review. *Thin Solid Films*, 102(1) :1–46, April 1983.
- [90] Sylvie Faÿ. *L'oxyde de zinc par dépôt chimique en phase vapeur comme contact électrique transparent et diffuseur de lumière pour les cellules solaires*. PhD thesis, 2003.
- [91] Petr Beckmann and Andre Spizzichino. *The Scattering of Electromagnetic Waves from Rough Surfaces*. Artech Print on Demand, Norwood, MA, 1987.
- [92] J. Krc, M. Zeman, O. Kluth, F. Smole, and M. Topic. Effect of surface roughness of ZnO:Al films on light scattering in hydrogenated amorphous silicon solar cells. *Thin Solid Films*, 426(1–2) :296–304, 2003.
- [93] Tadatsugu Minami, Takashi Yamamoto, and Toshihiro Miyata. Highly transparent and conductive rare earth-doped ZnO thin films prepared by magnetron sputtering. *Thin Solid Films*, 366(1–2) :63–68, 2000.
- [94] Tadatsugu Minami. Transparent conducting oxide semiconductors for transparent electrodes. *Semiconductor Science and Technology*, 20(4) :S35, 2005.
- [95] Jaehyung Lee, Donggun Lim, Keajoon Yang, and Wonseok Choi. Influence of different plasma treatments on electrical and optical properties on sputtered AZO and ITO films. *Journal of Crystal Growth*, 326(1) :50–57, 2011.

- [96] Jérôme Garnier. *Elaboration de couches minces d'oxydes transparents et conducteurs par spray cvd assisté par radiation infrarouge pour applications photovoltaïques*. PhD thesis, Arts et Métiers ParisTech, 2009.
- [97] E. Elangovan and K. Ramamurthi. A study on low cost-high conducting fluorine and antimony-doped tin oxide thin films. *Applied Surface Science*, 249(1–4) :183–196, 2005.
- [98] D. H. Zhang and H. L. Ma. Scattering mechanisms of charge carriers in transparent conducting oxide films. *Applied Physics A*, 62(5) :487–492, 1996.
- [99] Seungsin Baek, Jeong C. Lee, Youn-Jung Lee, Sk Md Iftiqar, Youngkuk Kim, Jinjoo Park, and Junsin Yi. Interface modification effect between p-type a-SiC:H and ZnO:Al in p-i-n amorphous silicon solar cells. *Nanoscale Research Letters*, 7(1) :81, 2012.
- [100] A. Shah, M. Vaněček, J. Meier, F. Meillaud, J. Guillet, D. Fischer, C. Droz, X. Niquille, S. Faÿ, E. Vallat-Sauvain, V. Terrazzoni-Daudrix, and J. Bailat. Basic efficiency limits, recent experimental results and novel light-trapping schemes in a-Si:H, μ c-Si:H and ‘micromorph tandem’ solar cells. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 338-340 :639–645, 2004.
- [101] W. Beyer, J. Hüpkes, and H. Stiebig. Transparent conducting oxide films for thin film silicon photovoltaics. *Thin Solid Films*, 516(2–4) :147–154, 2007.
- [102] Anderson Janotti and Chris G Van de Walle. Fundamentals of zinc oxide as a semiconductor. *Reports on Progress in Physics*, 72(12) :126501, 2009.
- [103] Jeung Hun Park, Jong Moon Shin, S. Cha, Jin Woo Park, S. Jeong, Hyuk K. Pak, and C. Cho. Deposition-temperature effects on AZO thin films prepared by RF magnetron sputtering and their physical properties. *Journal-Korean Physical Society*, 49 :S584, 2006.
- [104] J. Krc, K. Brecl, F. Smole, and M. Topic. The effects of enhanced light trapping in tandem micromorph silicon solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 90(18–19) :3339–3344, 2006.
- [105] Laurent Bergerot. *Etude de l'élaboration d'oxyde transparent conducteur de type-p en couches minces pour des applications à l'électronique transparente ou au photovoltaïque*. PhD thesis, Université Grenoble Alpes, 2015.
- [106] Julien Tranchant. *Etude de couches minces déposées par pulvérisation magnétron postionisée pour l'ingénierie de contraintes-cas du MoCr et de nanocanaux de carbone*. PhD thesis, Université de Nantes, 2007.
- [107] H. F. Sterling and R. C. G. Swann. Chemical vapour deposition promoted by r.f. discharge. *Solid-State Electronics*, 8(8) :653–654, 1965.

- [108] Annemie Bogaerts, Erik Neyts, Renaat Gijbels, and Joost van der Mullen. Gas discharge plasmas and their applications. *Spectrochimica Acta Part B : Atomic Spectroscopy*, 57(4) :609–658, 2002.
- [109] Sergio Pizzini. *Advanced Silicon Materials for Photovoltaic Applications*. John Wiley & Sons, 2012.
- [110] Safa Kasap. *Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials*. Springer Science & Business Media, 2006.
- [111] Akihisa Matsuda, Katsuhiko Nomoto, Yoshiaki Takeuchi, Atsushi Suzuki, Aki-masa Yuuki, and Jérôme Perrin. Temperature dependence of the sticking and loss probabilities of silyl radicals on hydrogenated amorphous silicon. *Surface Science*, 227(1) :50–56, 1990.
- [112] Akihisa Matsuda. Microcrystalline silicon. : Growth and device application. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 338–340 :1–12, 2004.
- [113] A. Kolodziej, P. Krewniak, and S. Nowak. Improvement thin film silicon. *Opto-electronics Review*, 11(4) :281–289, 2003.
- [114] S. Amtablian. *Du transfert de films minces de silicium monocristallin vers un procédé cellule à faible budget thermique*. Ph.D. thesis, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, Lyon, 2008.
- [115] B Rech, T Roschek, J Müller, S Wieder, and H Wagner. Amorphous and microcrystalline silicon solar cells prepared at high deposition rates using RF (13.56 MHz) plasma excitation frequencies. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 66(1–4) :267–273, 2001.
- [116] H. Curtins, N. Wyrsh, and A. V. Shah. High-rate deposition of amorphous hydrogenated silicon : effect of plasma excitation frequency. *Electronics Letters*, 23(5) :228–230, 1987.
- [117] R. H. Franken, C. H. M. van der Werf, J. Löffler, J. K. Rath, and R. E. I. Schropp. Beneficial effects of sputtered ZnO:Al protection layer on SnO₂:F for high-deposition rate hot-wire CVD p–i–n solar cells. *Thin Solid Films*, 501(1–2) :47–50, 2006.
- [118] Bruno Mauvernay. *Nanocomposites d’oxydes de fer en couches minces. Etudes de leur élaboration et de leurs propriétés en vue de leur utilisation comme matériaux sensibles pour la détection thermique*. PhD thesis, Université de Toulouse, Université Toulouse III-Paul Sabatier, 2007.
- [119] B. Vet and M. Zeman. Relation between the open-circuit voltage and the band gap of absorber and buffer layers in a-Si:H solar cells. *Thin Solid Films*, 516(20) :6873–6876, 2008.

- [120] Henry Mathieu. *Physique des semiconducteurs et des composants électroniques*. Masson, Paris ; Milan, 1990.
- [121] Nandita Palit. *Amorphous silicon based solar cells : experimental characterisation and computer modelling*. PhD thesis, Energy Research Unit, Indian Association for the Cultivation of Science, Jadavpur, Calcutta, India, 2000.
- [122] S. Fonash. *A Manual for AMPS-1D for Windows 95/NT*. The Pennsylvania State University, 1997.
- [123] Yiming Liu, Daniel Heinzl, and Angus Rockett. A revised version of the AMPS simulation code. In *Photovoltaic Specialists Conference (PVSC), 2010 35th IEEE*, pages 001943–001947. IEEE, 2010.
- [124] G. A. M. Hurkx, D. B. M. Klaassen, and M. P. G. Knuvers. A new recombination model for device simulation including tunneling. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 39(2) :331–338, 1992.
- [125] Kyoungsoon Yang, Jack R. East, and George I. Haddad. Numerical modeling of abrupt heterojunctions using a thermionic-field emission boundary condition. *Solid-State Electronics*, 36(3) :321–330, 1993.
- [126] Steven Durbin and Jeffery L. Gray. Conference Record of the IEEE Photovoltaic Specialists Conference. 1994.
- [127] Yiming Liu, Yun Sun, and Angus Rockett. A new simulation software of solar cells—wxAMPS. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 98 :124–128, 2012.
- [128] Y. Tawada, K. Tsuge, M. Kondo, K. Nishimura, H. Okamoto, and Y. Hamakawa. 8% Efficiency a-SiC:H/a-Si:H Heterojunction Solar Cells. In W. H. Bloss and G. Grassi, editors, *Fourth E.C. Photovoltaic Solar Energy Conference*, pages 698–703. Springer Netherlands, 1982.
- [129] Chang Hyun Lee, Jin Wan Jeon, and Koeng Su Lim. Ultrathin boron-doped microcrystalline silicon as a novel constant band gap buffer inserted at the p-a-SiC:H/i-a-Si:H interface of amorphous silicon solar cells. *Journal of Applied Physics*, 87(12) :8778–8785, 2000.
- [130] Joshua M. Pearce, Randy J. Koval, Andre S. Ferlauto, Robert W. Collins, Christopher R. Wronski, Jeffrey Yang, and Subbhendu Guha. Dependence of open-circuit voltage in hydrogenated protocrystalline silicon solar cells on carrier recombination in p/i interface and bulk regions. *Applied Physics Letters*, 77(19), 2000.
- [131] R. R. Arya, A. Catalano, and R. S. Oswald. Amorphous silicon p-i-n solar cells with graded interface. *Applied Physics Letters*, 49 :1089–1091, 1986.
- [132] W. Y. Kim, H. Tasaki, M. Hallerdt, M. Konagai, and K. Takahashi. Carbon-alloyed graded-bandgap layers prepared by photo-CVD : Effect on the p/i

- interface and application to the i-layer of amorphous silicon solar cells. pages 306–311, 1987.
- [133] S. Guha, J. Yang, P. Nath, and M. Hack. Enhancement of open circuit voltage in high efficiency amorphous silicon alloy solar cells. *Applied Physics Letters*, 49(4) :218–219, 1986.
- [134] Gijs van Elzakker, Jimmy Melskens, and Miro Zeman. Influence of deposition pressure on protocrystalline silicon films as solar cell absorber layer. In *ResearchGate*, 2007.
- [135] B. Vet and M. Zeman. Comparison of a-SiC:H and a-SiN:H as candidate materials for a p-i interface layer in a-Si:H p-i-n solar cells. *Energy Procedia*, 2(1) :227–234, August 2010.
- [136] M. I. Kabir, S. A. Shahahmadi, V. Lim, S. Zaidi, K. Sopian, and N. Amin. Amorphous Silicon Single-Junction Thin-Film Solar Cell Exceeding 10% Efficiency by Design Optimization. *International Journal of Photoenergy*, 2012, 2012.
- [137] D. Lundszen, F. Finger, and H. Wagner. A-Si:H buffer in a-SiGe:H solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 74(1–4) :365–372, 2002.
- [138] T. Roschek. Microcrystalline silicon solar cells prepared by 13.56 MHz PECVD. *Report Nr. : Berichte des Forschungszentrums Jülich JUEL-4083*, 2003.
- [139] A. Shah, E. Vallat-Sauvain, P. Torres, J. Meier, U. Kroll, C. Hof, C. Droz, M. Goerlitzer, N. Wyrsh, and M. Vanecek. Intrinsic microcrystalline silicon (μ c-Si:H) deposited by VHF-GD (very high frequency-glow discharge) : a new material for photovoltaics and optoelectronics. *Materials Science and Engineering : B*, 69 :219–226, 2000.
- [140] J Meier, S Dubail, S Golay, U Kroll, S Faÿ, E Vallat-Sauvain, L Feitknecht, J Dubail, and A Shah. Microcrystalline silicon and the impact on micromorph tandem solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 74(1-4) :457–467, 2002.
- [141] J. Yang, A. Banerjee, and S. Guha. Triple-junction amorphous silicon alloy solar cell with 14.6% initial and 13.0% stable conversion efficiencies. *Applied Physics Letters*, 70(22) :2975–2977, 1997.
- [142] S. Petibon. *Nouvelles architectures distribuées de gestion et conversion de l'énergie pour les applications photovoltaïques*. PhD thesis, Université Paul Sabatier-Toulouse III, 2009.
- [143] M. Zeman, J.A. Willemen, L.L.A. Vosteen, G. Tao, and J.W. Metselaar. Computer modelling of current matching in a-Si:H/a-Si:H tandem solar cells on

- textured TCO substrates. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 46(2) :81–99, 1997.
- [144] Jingya Hou, Jianping Xi, Frank Kampas, Sanghoon Bae, and S. J. Fonash. Non-Local Recombination in “Tunnel Junctions” of Multijunction Amorphous Si Alloy Solar Cells. *MRS Online Proceedings Library*, 336, 1994.
- [145] S. Schicho. *Amorphous and microcrystalline silicon applied in very thin tandem solar cells*. Number Bd. 99 in Schriften des Forschungszentrums Jülich Reihe Energie & Umwelt. Forschungszentrum Jülich, Jülich, 2011.
- [146] Joonghwan Kwak, Seong Won Kwon, and Koeng Su Lim. Fabrication of a n–p–p tunnel junction for a protocrystalline silicon multilayer/amorphous silicon tandem solar cell. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 352(9–20) :1847–1850, 2006.
- [147] Ping-Kuan Chang, Chun-Hsiung Lu, Chih-Hung Yeh, and Mau-Phon Houng. High efficiency a-Si:H/a-Si:H solar cell with a tunnel recombination junction and a n-type $\mu\text{c-Si:H}$ layer. *Thin Solid Films*, 520(9) :3684–3687, 2012.
- [148] J. K. Rath, F. A. Rubinelli, and R. E. I. Schropp. Microcrystalline n- and p-layers at the tunnel junction of a-Si:H/a-Si:H tandem cells. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 227 :1282–1286, 1998.
- [149] Shaoying Ke, Chong Wang, Tao Pan, Jie Yang, and Yu Yang. Numerical simulation of the performance of the a-Si:H/a-SiGe:H/a-SiGe:H tandem solar cell. *Journal of Semiconductors*, 35(3) :034013, 2014.
- [150] M. Zeman and J. Krc. Optical and electrical modeling of thin-film silicon solar cells. *Journal of Materials Research*, 23 :889–000, 2008.
- [151] F. A. Rubinelli. Microcrystalline n-i-p tunnel junction in a-Si:H/a-Si:H tandem cells. *Journal of Applied Physics*, 89(7) :4010–4018, 2001.
- [152] F. Maachou, B. Zebentout, A. Bensmain, Z. Benamara, and T.M. Brahim. Investigation of improved PV parameters through AMPS-1d in micromorph tandem solar cells with a microcrystalline tunnel recombination junction. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 627(1) :29–37, 2016.
- [153] Wen-Jie Yao, Xiang-Bo Zeng, Wen-Bo Peng, Shi-Yong Liu, Xiao-Bing Xie, Chao Wang, and Xian-Bo Liao. The p recombination layer in tunnel junctions for micromorph tandem solar cells. *Chinese Physics B*, 20(7) :078402, 2011.
- [154] J. Meier, J. Spitznagel, U. Kroll, C. Bucher, S. Fay, T. Moriarty, and A. Shah. Potential of amorphous and microcrystalline silicon solar cells. *Thin Solid Films*, 451-452 :518–524, 2004.

- [155] A. V. Shah, H. Schade, M. Vanecek, J. Meier, E. Vallat-Sauvain, N. Wyrsh, U. Kroll, C. Droz, and J. Bailat. Thin-film silicon solar cell technology. *Progress in photovoltaics : Research and applications*, 12(2-3) :113–142, 2004.
- [156] A. Belfar and R. Mostefaoui. Simulation of n1-p2 Microcrystalline Silicon Tunnel Junction with AMPS-1d in a-Si:H/ μ c-Si:H Tandem Solar Cells. *Journal of Applied Sciences*, 11(16) :2932–2939, 2011.
- [157] A. Sturiale, Hongbo T. Li, J. K. Rath, R. E. I. Schropp, and F. A. Rubinelli. Exploring dark current voltage characteristics of micromorph silicon tandem cells with computer simulations. *Journal of Applied Physics*, 106(1) :014502, 2009.
- [158] X. Multone, L. Fesquet, D. Borrello, D. Romang, G. Choong, E. Vallat-Sauvain, M. Charrière, A. Billet, J.-F. Boucher, J. Steinhauser, J.-B. Orhan, R. Monnard, J.-P. Cardoso, G. Charitat, B. Dehbozorgi, N. Guillot, G. Monteduro, M. Marmelo, R. Semenzi, S. Benagli, and J. Meier. Triple-junction amorphous/microcrystalline silicon solar cells : Towards industrially viable thin film solar technology. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 140 :388–395, 2015.
- [159] AngÃ le Reinders, Pierre Verlinden, and Alexandre Freundlich. *Photovoltaic Solar Energy : From Fundamentals to Applications*. John Wiley & Sons, 2017.
- [160] Hitoshi Sai, Takuya Matsui, and Koji Matsubara. Stabilized 14.0%-efficient triple-junction thin-film silicon solar cell. *Applied Physics Letters*, 109(18) :183506, 2016.

Annexes

Annexe A : Paramètres utilisés dans les simulations

A.1 Représentation des défauts de la bande interdite du a-Si:H dans AMPS-1D

A.1.1 Représentation des niveaux pièges discrets

La Figure A.1 illustre les niveaux de pièges discrets de type donneur et de type accepteur dans la bande interdite du a-Si:H. Les paramètres caractéristiques des niveaux de pièges discrets sont définis dans le Tableau A.1.

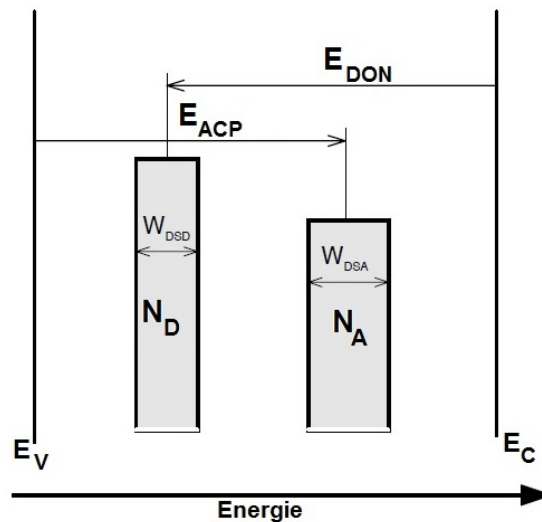


Figure A.1 – Exemple de représentation de pièges discrets de type donneur et de type accepteur localisés dans la bande interdite du a-Si:H, d'après [122].

A.1.2 Représentation des états de queues de bande

Les queues de bandes représentent les états en bord de bande de valence et de bande de conduction qui sont de type donneur et de type accepteur, respectivement. Elles sont modélisées par une distribution exponentielle décroissante. Dans AMPS-1D, leur expression est donnée par :

- pour la queue de bande de valence (de type donneur) :

$$G_D(E) = G_{D0} \exp\left(-\frac{E - E_V}{E_D}\right) \quad (\text{A.1})$$

- pour la queue de bande de conduction (de type accepteur) :

$$G_A(E) = G_{A0} \exp\left(\frac{E - E_C}{E_A}\right) \quad (\text{A.2})$$

La Figure A.2 illustre une représentation en forme de V de la densité d'états localisée dans la bande interdite du a-Si:H constituée de queues de bande.

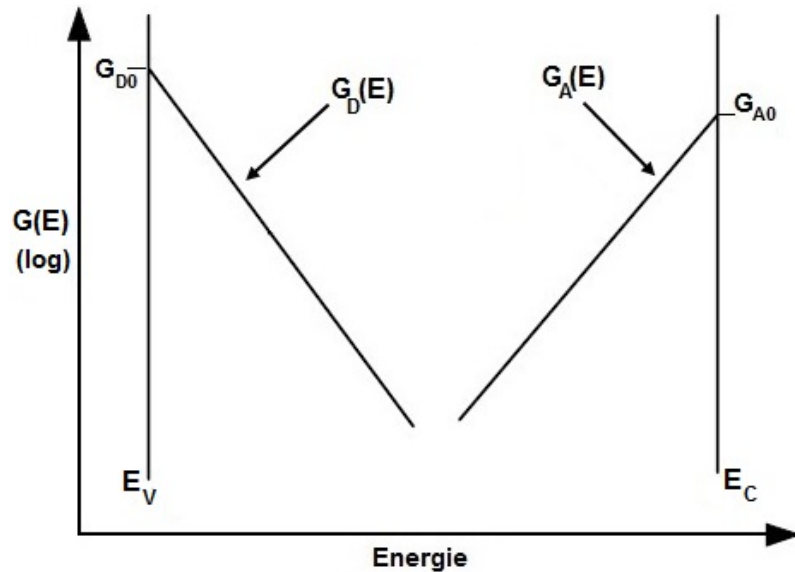


Figure A.2 – Représentation en forme de V de la densité d'états localisée dans la bande interdite du a-Si:H, d'après [122].

La Figure A.3 illustre une représentation en forme de U de la densité d'états localisée dans la bande interdite du a-Si:H qui comporte des queues de bande et une distribution constante des états de Midgap.

Les paramètres caractéristiques des queues de bande et des défauts Midgap sont définis dans le Tableau A.1.

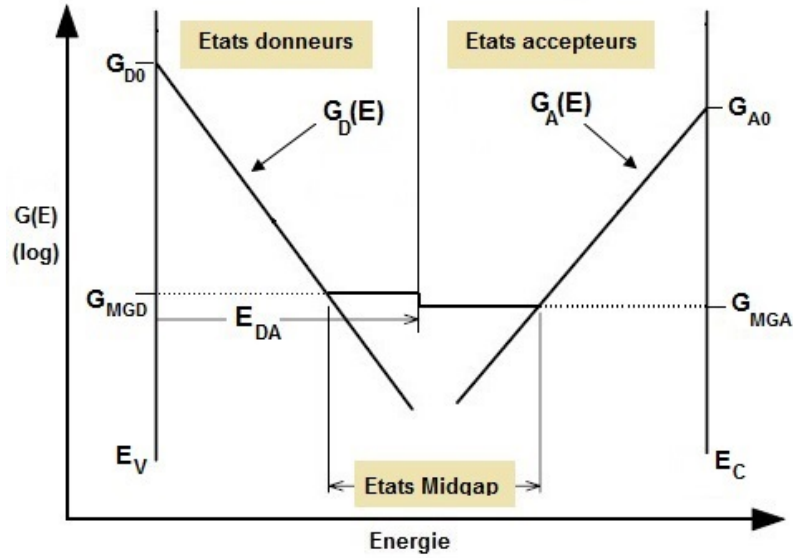


Figure A.3 – Représentation en forme de U de la densité d'états localisée dans la bande interdite du a-Si:H, d'après [122].

A.1.3 Représentation des liaisons pendantes

Les défauts profonds correspondent aux liaisons pendantes représentées par deux distributions gaussiennes comme illustré à la Figure A.4. Dans AMPS-1D, leur expression est donnée par :

- pour les liaisons pendantes de type donneur :

$$G_D(E) = N_{DG} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{E - E_{DONG}}{W_{DSDG}} \right)^2 \right] \quad (\text{A.3})$$

- pour les liaisons pendantes de type accepteur :

$$G_A(E) = N_{AG} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{E - E_{ACPG}}{W_{DSAG}} \right)^2 \right] \quad (\text{A.4})$$

Les paramètres caractéristiques des liaisons pendantes sont définis dans le Tableau A.1.

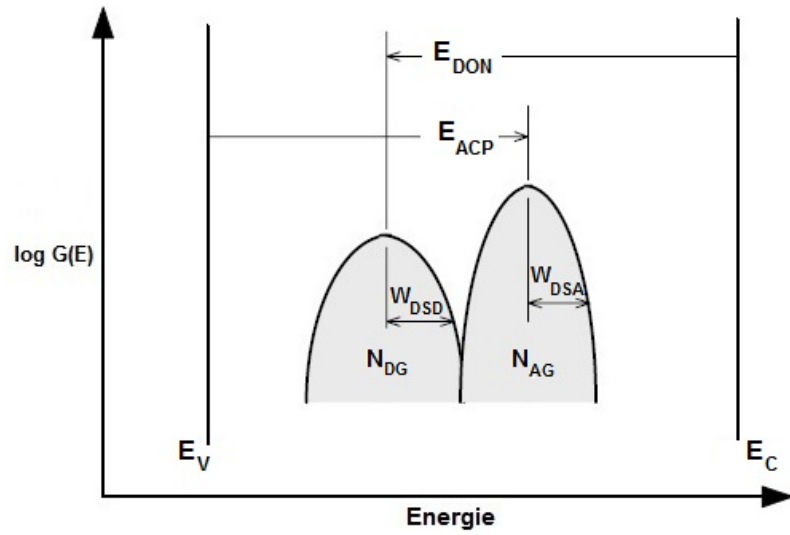


Figure A.4 – Représentation des distributions de types gaussiennes des états profonds localisés dans la bande interdite du $a\text{-Si:H}$, d'après [122].

A.2 Désignation des paramètres des défauts utilisés dans AMPS-1D

Paramètres des défauts			
Symboles	Paramètres électriques		
Pièges discrets	Etats Donneurs		
	$N_{D(i)}$	Concentration au niveau donneur i	
	$E_{DON(i)}$ ^a	Energie d'ionisation au niveau donneur i	
	$W_{DSD(i)}$	largeur de la bande du niveau donneur i	
	$D_{SIG/ND(i)}$	Section efficace de capture des électrons du niveau i	
	$D_{SIG/PD(i)}$	Section efficace de capture des trous du niveau i	
	Etats Accepteurs		
	$N_{A(i)}$	Concentration au niveau accepteur i	
	$E_{ACP(i)}$ ^b	Energie d'ionisation au niveau accepteur i	
	$W_{DSA(i)}$	largeur de la bande du niveau accepteur i	
	$D_{SIG/NA(i)}$	Section efficace de capture des électrons du niveau i	
	$D_{SIG/PA(i)}$	Section efficace de capture des trous du niveau i	
	Queues de bandes	Etats Donneurs	
		G_{D0}	Densité d'états d'intersection de queues de bandes avec la BV
E_D		Energie caractéristique de BV	
$T_{SIG/ND}$		Section efficace de capture des électrons	
$T_{SIG/PD}$		Section efficace de capture des trous	
Etats Accepteurs			
G_{A0}		Densité d'états d'intersection de queues de bandes avec la BC	
E_A		Energie caractéristique de BC	
$T_{SIG/NA}$		Section efficace de capture des électrons	
$T_{SIG/PA}$		Section efficace de capture des trous	
Midgap	Etats Donneurs		
	G_{MGD}	Densité d'états des midgaps	
	E_{DA}	Energie de « switch-over » des midgaps	
	$M_{SIG/ND}$	Section efficace de capture des électrons	
	$M_{SIG/PD}$	Section efficace de capture des trous	
	Etats Accepteurs		
	G_{MGA}	Densité d'états des midgaps	
	$M_{SIG/NA}$	Section efficace de capture des électrons	
$M_{SIG/PA}$	Section efficace de capture des électrons		
Liaisons pendantes	Etats Donneurs		
	N_{DG}	Densité d'états des gaussiennes	
	E_{DONG} ^a	Position en énergie des pics des gaussiennes	
	W_{DSGD}	Déviations standard des gaussiennes	
	$G_{SIG/ND}$	Section efficace de capture des électrons	
	$G_{SIG/PD}$	Section efficace de capture des trous	
	Etats Accepteurs		
	N_{AG}	Densité d'états des gaussiennes	
	E_{ACPG} ^b	Position en énergie des pics des gaussiennes	
	W_{DSGA}	Déviations standard des gaussiennes	
	$G_{SIG/NA}$	Section efficace de capture des électrons	
	$G_{SIG/PA}$	Section efficace de capture des trous	

^a mesurée positivement par rapport à la bande de conduction (BC); ^b mesurées positivement par rapport à la bande de valence (BV).

Tableau A.1 – Paramètres des différents défauts de la bande interdite du a-Si:H utilisés dans AMPS-1D.

A.3 Tableaux des paramètres de simulation utilisés dans l'AMPS-1D, le wxAMPS2 et le wxAMPS3

A.3.1 Tableau des paramètres généraux

Paramètres généraux												
Paramètres	Symboles	Unités	(p) a-SiC:H	(i) a-SiC:H	defect p-i	(i) a-Si:H	(n) a-Si:H	(p) μ c-Si:H	(i) μ c-Si:H	(n) μ c-Si:H	n^+ (TRJ)	p^+ (TRJ)
Epaisseur	d	nm	5	2	10	-	10	20	-	20	5	5
Permittivité	ϵ_r	-	11,9	11,9	11,9	11,9	11,9	11,9	11,9	11,9	11,9	11,9
Gap de mobilité	E_G	eV	1,96	1,96	1,72	1,82	1,82	1,14	1,14	1,14	1	1
Gap optique	E_{opt}	eV	1,88	1,88	1,72	1,72	1,72	1,14	1,14	1,14	1	1
Affinité électronique	χ	eV	3,7	3,7	3,8	3,8	3,8	4	4	4	4	4
Densité d'états effective (BC)	N_C	cm^{-3}	$2,5 \times 10^{20}$	$2,5 \times 10^{20}$	$2,5 \times 10^{20}$	$2,5 \times 10^{20}$	$2,5 \times 10^{20}$	3×10^{19}	3×10^{19}	3×10^{19}	3×10^{19}	3×10^{19}
Densité d'états effective (BV)	N_V	cm^{-3}	$2,5 \times 10^{20}$	$2,5 \times 10^{20}$	$2,5 \times 10^{20}$	$2,5 \times 10^{20}$	$2,5 \times 10^{20}$	2×10^{19}	2×10^{19}	2×10^{19}	2×10^{19}	2×10^{19}
Mobilité des électrons	μ_e	cm^2/Vs	5	10	20	20	10	20	140	20	20	20
Mobilité des trous	μ_h	cm^2/Vs	0,5	1	2	2	1	2	48	2	2	2
Dopage type n	N_D	cm^{-3}	0	0	0	1×10^{15}	1×10^{19}	0	1×10^{15}	1×10^{19}	1×10^{20}	0
Dopage type p	N_A	cm^{-3}	1×10^{19}	0	6×10^{17}	0	0	1×10^{19}	0	0	0	1×10^{20}
Energie d'activation	E_a	eV	0,4	-	-	-	0,14	0,03	-	0,03	0,03	0,03

Tableau A.2 – Paramètres généraux des couches de a-Si:H et de μ c-Si:H utilisés dans AMPS-1D et wxAMPS2(3).

A.3.2 Tableau des paramètres des défauts

Paramètres des défauts											
Symboles	Unités	(p) a-SiC:H	(i) a-SiC:H	defect p-i	(i) a-Si:H	(n) a-Si:H	(p) μ c-Si:H	(i) μ c-Si:H	(n) μ c-Si:H	n^+ (TRJ)	p^+ (TRJ)
Queues de bandes											
Etats Donneurs											
G_{D0}	$cm^{-3}eV^{-1}$	1×10^{21}	1×10^{21}	1×10^{21}	1×10^{21}	1×10^{21}	1×10^{20}	1×10^{19}	1×10^{20}	1×10^{20}	1×10^{20}
E_D	eV	0,12	0,12	0,05	0,05	0,05	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03
$T_{SIG/ND}$	cm^2	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}
$T_{SIG/PD}$	cm^2	1×10^{-17}	1×10^{-17}	1×10^{-17}	1×10^{-17}	1×10^{-17}	1×10^{-17}	1×10^{-17}	1×10^{-17}	1×10^{-17}	1×10^{-17}
Etats Accepteurs											
G_{A0}	$cm^{-3}eV^{-1}$	1×10^{21}	1×10^{21}	1×10^{21}	1×10^{21}	1×10^{21}	1×10^{20}	1×10^{19}	1×10^{20}	1×10^{20}	1×10^{20}
E_A	eV	0,07	0,07	0,03	0,03	0,03	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
$T_{SIG/NA}$	cm^2	1×10^{-17}	1×10^{-17}	1×10^{-17}	1×10^{-17}	1×10^{-17}	1×10^{-17}	1×10^{-17}	1×10^{-17}	1×10^{-17}	1×10^{-17}
$T_{SIG/PA}$	cm^2	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}
Midgap											
Etats Donneurs											
G_{MGD}	$cm^{-3}eV^{-1}$	-	-	-	-	-	1×10^{16}	5×10^{15}	1×10^{16}	1×10^{21}	1×10^{20}
E_{DA}	eV	-	-	-	-	-	0,57	0,57	0,57	0,57	0,57
$M_{SIG/ND}$	cm^2	-	-	-	-	-	1×10^{-14}	1×10^{-14}	1×10^{-14}	1×10^{-12}	1×10^{-12}
$M_{SIG/PD}$	cm^2	-	-	-	-	-	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-13}	1×10^{-13}
Etats Accepteurs											
G_{MGA}	$cm^{-3}eV^{-1}$	-	-	-	-	-	1×10^{16}	5×10^{15}	1×10^{16}	1×10^{21}	1×10^{20}
$M_{SIG/NA}$	cm^2	-	-	-	-	-	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-13}	1×10^{-13}
$M_{SIG/PA}$	cm^2	-	-	-	-	-	1×10^{-14}	1×10^{-14}	1×10^{-14}	1×10^{-12}	1×10^{-12}
Liaisons pendantes											
Etats Donneurs											
N_{DG}	$cm^{-3}eV^{-1}$	$2,5 \times 10^{18}$	1×10^{15}	1×10^{18}	5×10^{16}	1×10^{18}	-	-	-	-	-
E_{DONG}	eV	1,1	1,1	1,08	1,24	1,1	-	-	-	-	-
W_{DSGD}	eV	0,15	0,15	0,15	0,15	0,15	-	-	-	-	-
$G_{SIG/ND}$	cm^2	1×10^{-14}	1×10^{-14}	1×10^{-14}	1×10^{-14}	1×10^{-14}	-	-	-	-	-
$G_{SIG/PD}$	cm^2	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}	-	-	-	-	-
Etats Accepteurs											
N_{AG}	$cm^{-3}eV^{-1}$	$2,5 \times 10^{18}$	1×10^{15}	1×10^{18}	5×10^{16}	1×10^{18}	-	-	-	-	-
E_{ACPG}^*	eV	1,1	1,1	1,18	1,02	1,1	-	-	-	-	-
W_{DSGA}	eV	0,15	0,15	0,15	0,15	0,15	-	-	-	-	-
$G_{SIG/NA}$	cm^2	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}	-	-	-	-	-
$G_{SIG/PA}$	cm^2	1×10^{-14}	1×10^{-14}	1×10^{-14}	1×10^{-14}	1×10^{-14}	-	-	-	-	-

* Dans wxAMPS, cette position énergétique est mesurée positivement par rapport à la bande de conduction (BC). Elle a pour valeur $E_G - E_{ACPG}$.

Tableau A.3 – Paramètres des défauts des couches de a-Si:H et de μ c-Si:H utilisés dans AMPS-1D, wxAMPS2 et wxAMPS3.

A.4 Paramètres des contacts

Paramètres	Contact avant		Contact arrière	
Barrière de potentiel (eV)*	PHIB0	1,56	PHIBL	0,03
Vitesse de recombinaison en surface des électrons (cm/s)	SN0	1×10^7	SNL	1×10^7
Vitesse de recombinaison en surface des trous (cm/s)	SP0	1×10^7	SPL	1×10^7
Coefficient de réflexion	RF	0	RB	1

* $PHIB = E_C - E_F$

Tableau A.4 – Paramètres des contacts utilisés dans AMPS-1D et wxAMPS.

Abstract :

Thin-film silicon solar cells are a low-cost technology and an alternative to traditional wafer-based crystalline solar cells. This work focused on the analysis and optimization of photovoltaic parameters of thin-film silicon solar cells in order to obtain higher efficiency. One of the approaches to improve efficiency is to develop solutions for enhancing the open circuit voltage V_{oc} . For our numerical simulations, AMPS-1D software, which was developed by the group of Prof. Fonash from Penn state University and, wxAMPS2 and wxAMPS3, which were designed at the University of Illinois at Urbana Champaign, in collaboration with Nankai University of China, were used. Firstly, optical and electrical properties of the layers, p-i interface (larger band gap of p-doped window layer, inserting buffer layer) and the active layer (i-layer) thickness in amorphous hydrogenated silicon (a-Si:H) and microcrystalline hydrogenated silicon (μ c-Si:H) p-i-n single-junction solar cells have been optimized. Their efficiency, however, remains low and limited. In order to achieve higher and stabilized efficiency for a-Si:H solar cells, multijunction approach is used. We simulated and optimized a tandem micromorph solar cell (a-Si:H/ μ c-Si:H) and a triple-junction solar cell (a-Si:H/ μ c-Si:H/ μ c-Si:H). In multijunction structure, an optimized tunnel recombination junction (TRJ) between subcells and a careful current matching are required. Simulation results show that the structures achieved higher efficiency thanks to an improvement of V_{oc} due to a better use of the solar spectrum.

الملخص:

تعتبر الخلايا الشمسية السيليكونية ذات الأغشية الرقيقة تقنية أقل تكلفة وبدليل للخلايا الشمسية السيليكونية البلورية التقليدية. ركز هذا العمل على تحليل وتحسين العوامل الفولتضوئية للخلايا الشمسية السيليكونية ذات الأغشية الرقيقة من أجل الحصول على أعلى مردود. و من بين الإقترابات الموجودة لتحسين هذا المردود إيجاد حلول لتعزيز فولتية الدائرة المفتوحة V_{oc} . للمحاكاة، إستعملنا برنامج AMPS-1D الذي تم تطويره من قبل مجموعة البروفيسور فوناش من جامعة بنسلفانيا والبرامج wx-AMPS2 و wx-AMPS3 التي تم تصميمها في جامعة إلينوي في أوربانا شامبين بالتعاون مع جامعة نانكاى الصينية. أولاً، تم تحسين الخصائص البصرية والكهربائية للطبقات، والواجهة p-i (طبقة النافذة p ذو عرض واسع لفجوة الطاقة، وإدخال طبقة عازلة) وسمك الطبقة الذاتية (طبقة i) لدى الخلايا الشمسية p-i-n احادية الوصلة و المصنوعة كل من السيليسيوم الهلامي المهدرج (a-Si:H) و السيليسيوم المكروبلوري المهدرج (μ c-Si:H). ومع ذلك، لا يزال مردود الخلايا الشمسية منخفض ومحدود. و لتحقيق مردود عالي و أكثر استقراراً للخلايا الشمسية المعتمدة على a-Si:H، أستخدم نهج الخلايا المتعددة الوصلات. تم محاكاة و تحسين خلية شمسية مزدوجة الوصلة (a-Si:H/ μ c-Si:H) و خلية شمسية ثلاثية الوصلة (a-Si:H/ μ c-Si:H/ μ c-Si:H). تتطلب هذه البنية من الخلايا تحسين الصمام النفقي العامل على إعادة الإلتحام (TRJ) الموجود بين الوصلات المجاورة و تعديل بين كل التيارات الخلايا. لقد ظهرت النتائج أن تلك الخلايا تحقق مردود أعلى بفضل تحسن فولتية الدائرة المفتوحة V_{oc} و هذا نتيجة للإستغلال الجيد للطيف الشمسي.